高等学校理工科 电子科学与技术类课程 学习辅导丛书

# 半导体物理学 学习辅导与典型题解（第二版）

田敬民　张声良　编著

- 学习要点
- 习题分析
- 练习题及参考解答
- 考研试题详解

学习的帮手　考研的参谋

電子工業出版社
PUBLISHING HOUSE OF ELECTRONICS INDUSTRY
http://www.phei.com.cn

高等学校理工

电子科学与技术类i　　　　丛书

# 半导体物理学

## 学习辅导与典型题解

（第二版）

**学习的帮手　考研的参谋**

学习要点

习题分析

练习题及参考解答

考研试题详解

责任编辑：陈晓莉
责任美编：孙焱津

ISBN 978-7-121-10225-7

定价：29.00元

高等学校理工科电子科学与技术类课程学习辅导丛书

# 半导体物理学

## 学习辅导与典型题解

（第二版）

田敬民　张声良　编著

電子工業出版社
Publishing House of Electronics Industry
北京·BEIJING

## 内容简介

本书以国内高等院校广泛使用的由刘恩科、朱秉升、罗晋生编著的《半导体物理学》(第七版)为基础,根据教学与考研复习的实际要求,高度概括了各个章节的知识重点、难点及重要的物理概念,相应给出了一定数量的概念思考与练习题,在此基础上,精选了许多典型例题,并作了详细解答。

本书可作为高等院校电子科学与技术、微电子技术及相关专业学生的学习参考书,也可以作为报考相关专业方向的硕士学位研究生的复习资料。



**图书在版编目(CIP)数据**

半导体物理学学习辅导与典型题解/田敬民,张声良编著.第二版.—北京:电子工业出版社,2010.1
高等学校理工科电子科学与技术类课程学习辅导丛书
ISBN 978-7-121-10225-7

I.半… II.①田…②张… III.半导体物理学—高等学校—教学参考资料 IV.O47

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2010)第 007294 号

责任编辑:陈晓莉
印　　刷:北京市天竺颖华印刷厂
装　　订:三河市鑫金马印装有限公司
出版发行:电子工业出版社
　　　　　北京市海淀区万寿路 173 信箱　邮编 100036
开　　本:787×980　1/16　印张:17　字数:380 千字
印　　次:2010 年 1 月第 1 次印刷
印　　数:4000 册　定价:29.00 元

凡所购买电子工业出版社图书有缺损问题,请向购买书店调换。若书店售缺,请与本社发行部联系。联系及邮购电话:(010)88254888。

质量投诉请发邮件至 zlts@phei.com.cn,盗版侵权举报请发邮件至dbqq@phei.com.cn。

服务热线:(010)88258888。

# 再 版 前 言

半导体物理学是高等院校微电子学、电子科学与技术、光电子技术、电子材料等专业学生必修的一门专业基础课，也是此类专业硕士学位研究生入学考试的专业课程之一。

由于本课程是一门理论性和系统性较强的课程，要学好这门课程，除了深刻理解书中所涉及的概念、理论和方法之外，还必须加强相关实验和习题方面的训练，从而加深对教学内容的理解、增强分析问题和解决问题的能力。

本书是编者在多年教学实践的基础上，为密切配合国内高等院校广泛使用的，由刘恩科、朱秉升、罗晋生等编著的《半导体物理学》(第七版)的教学而编写的，各章节的编排次序均与教材一致。根据教学和考研的要求，对各章节知识重点、难点及重要概念进行了分析与高度概括，形成本课程各章的理论要点及复习重点。

在 2005 年出版的本书第一版的基础上，新编入了一定数量的概念思考与练习题，试图让读者对所学的理论知识得以自我检查和评估，以达到进一步深入理解的目的。

作为本书的一个重要部分，编著者参考了国内外相关教材，收集并提练了部分重点高等院校多届本科和研究生考研试题，加之编者在多年教学中的积累，选编了一定数量典型的、具有一定难度的、针对性和启发性较强的例题，并作出了详尽的解析。通过对这些解题过程的理解和学习，感受其对所学数学物理知识的灵活应用。相信对深化本课程的学习内容，提高读者观察问题、解决问题的能力，开拓知识境界和思路能起到积极的推动作用。

本书在出版过程中，得到了《半导体物理学》(第七版)的编著者刘恩科教授、朱秉升教授、罗晋生教授的热心鼓励和帮助，电子工业出版社陈晓莉编审提出了许多宝贵意见，对此表示诚挚的感谢。

由于编者水平所限，书中难免存在错误之处，恳请读者批评指正。

编著者

2009 年 12 月

# 目　　录

# 第 1 章　半导体中的电子状态

**主题词**

晶体结构，单电子近似，能带（导带、价带、禁带及其宽度），布里渊区，有效质量，空穴，回旋共振，硅、锗、砷化镓的能带结构，二元及多元化合物半导体，宽禁带半导体。

## 1.1　理论概要与重点分析

（1）固体可分为晶体、非晶体两大类。晶体是其原子按一定规律周期性重复排列而组成的，周期性是晶体结构的主要特征。半导体硅、锗是金刚石结构，它的晶胞是正立方体，可看成是由两个面心立方沿体对角线方向移动 1/4 套构而成的。闪锌矿结构与金刚石结构相似，唯一差别是在体对角线 1/4 处的 4 个原子和格点上其他原子不同，Ⅲ-Ⅴ族化合物半导体如 GaAs 即为此例。

（2）晶体的周期性决定了晶体中电子势场的周期性，在周期性势场中电子的运动状态，可用单电子近似来描写，其薛定谔方程所决定的波函数为布洛赫函数，即

$$\psi_k(r) = u_k(r)\mathrm{e}^{\mathrm{i}2\pi k\cdot r} \tag{1.1}$$

式中

$$u_k(r) = u_k(r+na)$$

是与晶格周期相同的周期性函数。它反映了周期势场对电子运动的影响，晶体中的电子在某一原胞中的不同位置出现的概率不同，而在不同的原胞的各等价位置出现的概率相同。平面波因子 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}2\pi k\cdot r}$表明晶体中的电子不再是局域化，而是扩展到整个晶体中。布洛赫函数表明了晶体中各原子层电子的共有化运动。

（3）单电子近似结果直接表明孤立原子凝聚成为晶体时其中的电子状态形成能带，这就是通常所说的能带论。根据能带论的结果，晶体中电子能量随其电子波波矢 $\boldsymbol{k}$ 的不同而变化，即 $E(\boldsymbol{k})$关系。能量 $E$ 在波矢 $\boldsymbol{k}=\frac{n}{2a}$处出现不连续而发生阶跃，这部分不允许电子存在的能量范围，称为禁带。其他部分 $E$ 随 $\boldsymbol{k}$ 连续变化，形成允带，晶体中的电子处在一系列的允带中。$\boldsymbol{k}=\frac{n}{2a}$处的界面把 $\boldsymbol{k}$ 空间分割成若干个相等的区域，这些区域称为布里渊区。对有限大的晶体，利用周期性边界条件，在布里渊区中 $\boldsymbol{k}$ 的取值是量子化的，其可能取值为

$$k_x = \frac{n_x}{L} \qquad (n_x = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots)$$

$$k_y = \frac{n_y}{L} \qquad (n_y = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots) \tag{1.2}$$

$$k_z = \frac{n_z}{L} \qquad (n_z = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots)$$

式中，$L$ 为立方晶体的边长，因而能带中的能级是不连续或准连续的，其能级的数目等于晶体中的原胞数。

(4) 由于实际晶体中其内部势场难以找出具体表达形式，因而整个能带中 $E(\boldsymbol{k})$关系难以确定。所幸的是导带中的电子和价带的空穴仅存在于能带底和能带顶附近。将 $E(\boldsymbol{k})$在导带极小和价带极大值附近展开，取至二次项。由于晶体的各向异性，$E(\boldsymbol{k})$关系一般是各向不同的，设导带极小值发生在 $\boldsymbol{k}_0$点，在三维 $\boldsymbol{k}$ 空间中，$E(\boldsymbol{k})$关系近似表达为

$$E(\boldsymbol{k}) = E(\boldsymbol{k}_0) + \frac{h^2}{2}\left[\frac{(k_x - k_{0x})^2}{m_x^*} + \frac{(k_y - k_{0y})^2}{m_y^*} + \frac{(k_z - k_{0z})^2}{m_z^*}\right] \tag{1.3}$$

式中

$$\begin{cases} m_x^* = \left(\dfrac{1}{h^2}\dfrac{\partial^2 E}{\partial k_x^2}\right)^{-1} \\ m_y^* = \left(\dfrac{1}{h^2}\dfrac{\partial^2 E}{\partial k_y^2}\right)^{-1} \\ m_z^* = \left(\dfrac{1}{h^2}\dfrac{\partial^2 E}{\partial k_z^2}\right)^{-1} \end{cases} \tag{1.4}$$

分别为三主轴方向的电子有效质量，一般情况下 $m_x^*$、$m_y^*$、$m_z^*$ 不等，显示出它的各向异性。式(1.3)可改写为

$$\frac{(k_x - k_{0x})^2}{\dfrac{2m_x^*(E - E_0)}{h^2}} + \frac{(k_y - k_{0y})^2}{\dfrac{2m_y^*(E - E_0)}{h^2}} + \frac{(k_z - k_{0z})^2}{\dfrac{2m_z^*(E - E_0)}{h^2}} = 1 \tag{1.5}$$

式(1.5)为 $\boldsymbol{k}$ 空间中的一椭球方程。

当 $E$ 一定时，所有 $k_x$、$k_y$、$k_z$ 的可能取值构成一个能量为 $E$ 的封闭椭球面，称为等能面。

当 $m_x^* = m_y^* = m_t$，$m_z^* = m_l$ 时，式(1.5)变为

$$\frac{(k_x - k_{0x})^2 + (k_y - k_{0y})^2}{\dfrac{2m_t(E - E_0)}{h^2}} + \frac{(k_z - k_{0z})^2}{\dfrac{2m_l(E - E_0)}{h^2}} = 1 \tag{1.6}$$

为旋转椭球等能面。

当 $m_x^* = m_y^* = m_z^* = m_n^*$，且 $k_0 = 0$ 时

$$E - E_0 = \frac{h^2(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)}{2m_n^*} \tag{1.7}$$

为极值在原点各向同性的球形等能面。

由于晶体的对称性，能带在某一方向上有极值点，在其他对应方向的对应点也有极值

点，极值附近有相同的等能面。

(5) 在外加电场作用下，半导体中的电子除了受外电场的作用力 $f=-q|\varepsilon|$ 的作用外，还受到内部势场的作用。但内部势场难以精确确定，可以引入有效质量的概念来概括晶体内部势场的总作用。这样就只需将外部电场力和电子的有效质量相结合，我们仍能用经典力学的方法来描写晶体中电子运动规律，即

$$a=\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}t}=\frac{f}{m_{\mathrm{n}}^{*}} \tag{1.8}$$

式中，$m_{\mathrm{n}}^{*}$ 为电子的有效质量，它是由电子的 $E(\boldsymbol{k})$ 关系确定的，具体表达式如式(1.4)所示。可见在能带中能量极小值附近 $m_{\mathrm{n}}^{*}>0$，在能量极大值附近 $m_{\mathrm{n}}^{*}<0$。

应用有效质量的概念不仅能像自由电子一样很方便地用牛顿定律讨论晶体中电子的运动规律，而且因它与能带结构有关，借此有助于对半导体能带结构进行研究。

有效质量可以通过回旋共振实验测得，并据此推出半导体的能带结构。

根据半导体中电子在磁场作用下的运动规律推出回旋共振频率与磁感应强度 $\boldsymbol{B}$ 和有效质量之间的关系为

$$\omega_{\mathrm{c}}=\frac{q\boldsymbol{B}}{m_{\mathrm{n}}^{*}} \tag{1.9}$$

式中，$m_{\mathrm{n}}^{*}$ 为电子回旋共振有效质量，等能面为一般椭球情况，其表达式为

$$m_{\mathrm{n}}^{*}=\left(\frac{m_{x}^{*}\alpha^{2}+m_{y}^{*}\beta^{2}+m_{z}^{*}\gamma^{2}}{m_{x}^{*}m_{y}^{*}m_{z}^{*}}\right)^{-\frac{1}{2}} \tag{1.10}$$

式中，$\alpha$、$\beta$、$\gamma$ 分别为磁感应强度 $\boldsymbol{B}$ 与三轴方向的方向余弦。对等能面为旋转椭球时，其表达式为

$$m_{\mathrm{n}}^{*}=m_{\mathrm{t}}\left(\frac{m_{\mathrm{l}}}{m_{\mathrm{t}}\sin^{2}\theta+m_{\mathrm{l}}\cos^{2}\theta}\right)^{\frac{1}{2}} \tag{1.11}$$

式中，$m_{\mathrm{t}}$、$m_{\mathrm{l}}$ 分别为横向和纵向有效质量，$\theta$ 为 $\boldsymbol{B}$ 与椭球长轴的夹角。

实验中测出 $\boldsymbol{B}$ 在不同方向上半导体对电磁波共振吸收时的频率 $\omega_{\mathrm{c}}$ 代入式(1.9)，算出 $m_{\mathrm{n}}^{*}$，再代入式(1.11)从而确定 $m_{\mathrm{t}}$、$m_{\mathrm{l}}$。

将实验结果与理论分析相结合，即可了解半导体的能带结构，它包括能量极值点出现在布里渊区的位置，极值点附近等能面的形状，能量椭球的主轴方向，极值对称点出现的个数等。以 Si、Ge、GaAs 为例说明其导带，价带结构。

(6) 空穴是几乎被电子充满的能带中未被电子占据的少数空量子态，这少量的空穴总是处于能带顶附近。我们把半导体中的空穴看成一个带有电荷为 $+q$，并以该空穴状态相应电子的速度 $v(k)$ 运动的粒子，它具有正的有效质量，价带中大量电子的导电作用可用这少数空穴的导电作用来描写。因此半导体中有两种载流子，即导带中的电子和价带中的空穴，这是半导体导电最显著的特征。

(7) 禁带宽度是半导体性能的重要参数，它表示半导体导带能量极小值与价带能量极大值之间的能量差，也是价带电子激发到导带所需的最小能量，用 $E_{\mathrm{g}}$ 表示。各种半导

体其禁带宽度不同，一般认为 $E_g$<2.3eV 为窄禁带半导体，如研究最早、最成熟、应用也最为广泛的 Ge、Si、GaAs，在室温下其 $E_g$ 分别为 0.67eV、1.12eV、1.43eV。如果 $E_g$>2.3eV，就归为宽禁带半导体，如 3C-SiC、纤锌矿型的 GaN、AlN，其 $E_g$ 分别为 2.36eV、3.39eV、6.2eV。

由于宽禁带半导体材料的禁带宽、热导率高、电子饱和漂移速度大等特点，用以制作高功率、高温、高密度集成等特种器件；制作从可见到紫外光的发光管及光探测器，显示出它的特有功能。

## 1.2 概念思考与练习题

**【1-1】** 原子中的电子和晶体中电子受势场作用情况以及运动情况有何不同？原子中内层电子和外层电子参与共有化运动有何不同？

**【1-2】** 在 $N$ 个原子组成的晶体中，若由原来的一个原子能级分裂的能级数大于 $N$ 或小于 $N$，是否与泡利不相容原理矛盾？

**【1-3】** 如何理解能级"分裂"成能带？试以 NaCl（氯化钠）和 $C^6$ 为例，说明孤立原子的能级和能带的对应情况。

**【1-4】** 晶体体积的大小对能级和能带有什么影响？

**【1-5】** 描述半导体中电子运动为什么要引入"有效质量"的概念？用电子的惯性质量 $m_0$ 描述能带中电子运动有何局限性？

**【1-6】** 一般来说，对应于高能级的能带较宽，而禁带较窄，是否如此？为什么？

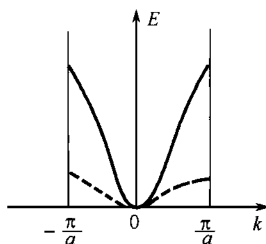



图 1-1 题 1-8 用图

**【1-7】** 通常，晶格势场对电子作用力 $F_L$ 是不容易直接测定的，但可以通过它与外场力 $F_e$ 的关系

$$F_L=\left(\frac{m_0}{m_n^*}-1\right)F_e$$

去求得。式中：$m_0$ 表示电子质量；$m_n^*$ 表示电子有效质量。试推导上述关系。

**【1-8】** 有两种晶体其能量与波矢的关系如图 1-1 所示。试问，哪一种晶体电子的有效质量大一些？为什么？

**【1-9】** 一维晶格能量 $E$ 与波矢 $\boldsymbol{k}$ 的关系如图 1-2 所示。分别讨论下面几个问题：

（1）如电子能谱和自由电子一样，写出与简约波矢 $k=\frac{\pi}{2a}$ 对应的 $A$（第Ⅰ能带）、$B$（第Ⅱ能带）、$C$（第Ⅲ能带）三点处的能量 $E$。

（2）图中，哪个能带上的电子有效质量最小？

（3）图中能带上是否有某些位置，外力对这些位置上的电子没有影响？

（4）若能带Ⅰ、Ⅱ完全填满，而能带Ⅲ是完全空着的，此时稍稍加热晶体，把少数电子从第Ⅱ能带激发到第Ⅲ能带，问第Ⅱ能带中的空穴数是否等于第Ⅲ能带中的电子数？

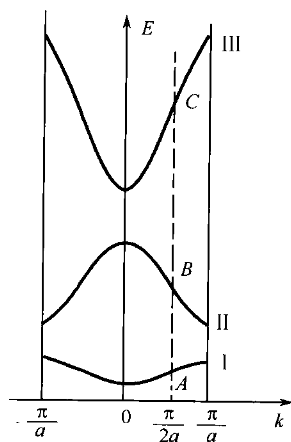


图 1-2　题 1 9 用图

(5) 第Ⅱ能带上空穴的有效质量$|m_p^*|$比第Ⅲ能带上的电子有效质量$|m_n^*|$大还是小？

(6) 比较能带Ⅱ空穴占据的能量间隔 $\Delta E_2$ 和能带Ⅲ上电子占据的能量间隔 $\Delta E_3$，哪一个大？

(7) 当 $k$ 为何值时，能带Ⅰ和能带Ⅱ之间，能带Ⅱ和能带Ⅲ之间发生跃迁需要的能量最小？

**【1-10】** 有效质量能反映出能带的宽度吗？有人说："有效质量越大，能态密度也越大，因而能带越窄。"是否如此？为什么？

**【1-11】** 简述有效质量与能带结构的关系。

**【1-12】** 对于自由电子，加速度方向与外力作用方向一致，这个结论是否适用于布洛赫电子？

**【1-13】** 从能带底到能带顶，晶体中电子的有效质量将如何变化？外场对电子的作用效果有什么不同？

**【1-14】** 试述在周期性势场中运动的电子具有哪些一般属性。

**【1-15】** 为什么说，通常有效质量是一个张量？何时出现负值？其物理意义如何？有什么比较直接的方法可以研究半导体中电子的有效质量？简要说明实验原理。

**【1-16】** 以硅的本征激发为例，说明由价带导带构成的半导体能带图的物理意义、价带和导带中能级与硅晶格结构中价键上电子和自由运动电子有何联系？为什么电子从其价键上挣脱出来所需的最小能量就是半导体的禁带宽度？

**【1-17】** 为什么半导体满带中的少量空状态可以用具有与电子电荷相等的正电荷和一定的有效质量的空穴来描述？

**【1-18】** 试论证空穴具有下述的主要特征：

(1) 空穴数等于价带中空状态数；

(2) 空穴所带的正电荷等于电子电荷；

(3) 空穴的有效质量$|m_p^*|$等于原空状态内电子有效质量的负值，即 $m_p^* = -m_n^*$；

(4) 空穴的波矢 $\boldsymbol{k}_p$ 等于原状态内电子波矢 $\boldsymbol{k}_n$ 的负值，即 $\boldsymbol{k}_p = -\boldsymbol{k}_n$；

(5) 空穴的能量 $E_p$ 等于原空状态内电子能量 $E_n$ 的负值，即 $E_p = -E_n$。

**【1-19】** 讨论晶体中电子在能带极值点附近速度 $v$ 与波矢 $\boldsymbol{k}$ 的关系？

**【1-20】** 有两块硅单晶，其中一块的质量是另一块质量的 2 倍。这两块晶体价带中的能级数是否相等？彼此有何联系？

**【1-21】** 解释布里渊区边界方程：$\boldsymbol{K}_n \cdot \left(\boldsymbol{k} - \frac{\boldsymbol{K}_n}{2}\right) = 0$ 的几何意义和物理意义。

**【1-22】** 对三维晶体来说，布里渊区边界面上发生能量的不连续，这种界面上能量的不连续是否意味着一定有禁带存在？

**【1-23】** 如果能量极值并不在 $\boldsymbol{k}$ 空间的原点，而是位于 $k_x$ 轴上某点处，则对应于同

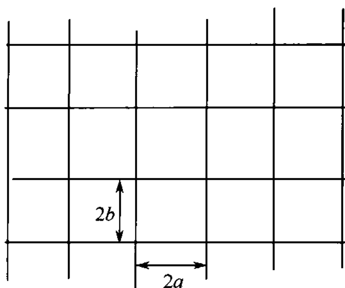


图 1-3　题 1-25 用图

一能量极值有多少个状态？如果能量极值是位于体对角线上的一点，情况又如何？

**【1-24】** 说明布里渊区和 $\boldsymbol{k}$ 空间等能面这两个物理概念的不同。

**【1-25】** 二维平面晶体如图 1-3 所示。晶格常数已注于图上。画出第 1、第 2 布里渊区的边界并简要说明画法的根据。

**【1-26】** 简述 Ge、Si 和 GaAs 能带结构的主要特征。分别画出 $\boldsymbol{k}$ 空间[100]和[111]方向的一维能带图，标出导带极小值和价带极大值在 $\boldsymbol{k}$ 空间中的位置。分别给出能带极值附近电子和空穴等能面形状。

**【1-27】** 置于均匀磁场半导体中的电子受到的洛伦兹力 $\boldsymbol{F}_{\mathrm{L}}=q\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B}$，式中速度 $\boldsymbol{v}$ 是由什么决定的？为什么说回旋共振实质上也是一种光吸收现象？

**【1-28】** 为什么极值附近的等能面是球面的半导体，当改变磁场方向时只能观察到一个共振吸收峰？

**【1-29】** 如何理解回旋共振有效质量 $m_{\mathrm{n}}^*$ 不仅通过 $m_x^*$、$m_y^*$ 和 $m_z^*$ 而与能带结构有关，而且还与磁场和等能面主轴之间的相对方位有关。

**【1-30】** 布洛赫函数中的波矢 $\boldsymbol{k}$ 有什么物理意义？什么是电子的准动量？它是否就是布洛赫电子的动量？为什么在运动方程中外力等于电子准动量的变化率 $\boldsymbol{F}=\hbar\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{k}}{\mathrm{d}t}$，而不等于电子真实动量的变化率？

**【1-31】** 已知某一半导体导带上两个电子的波矢，$k_1>0$，$k_2>0$（一维情况），且 $k_1>k_2$，能否让第一个电子的平均速度 $v_1$ 大于第二个电子的平均速度 $v_2$？为什么？

**【1-32】** 半导体的禁带宽度是如何定义的？为了得到不同禁带宽度的半导体，可以有哪些选择和方法？

**【1-33】** 宽禁带半导体相对窄禁带半导体有哪些特殊性质，因而在使用上显示出了哪些优越性？

**【1-34】** 以 SiC 晶体为例说明什么叫做同质多象变体。

## 1.3　典型例题解析

**【例 1-1】** 平面正三角形晶格的相邻间距是 $a$（见图 1-4）。(1)试求其正格子基矢和倒格子基矢；(2)画出其第一布里渊区，并求此区域的内切图半径。

**解：**

(1) 由于每个原子周围的情况完全相同，所以格点可以取原子本身。这种结构的布拉伐格子是二维六角格子。选取图 1-4(a)所示的直角坐标系，正格子基矢 $\boldsymbol{a}_1$ 和 $\boldsymbol{a}_2$ 可写为

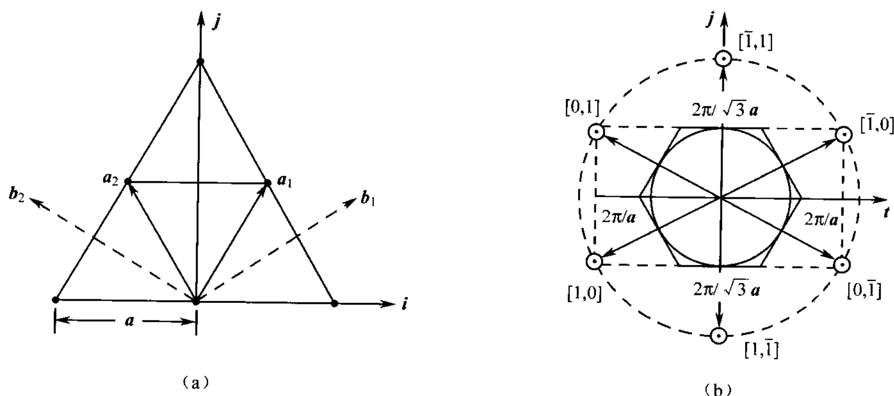



图 1 4　例 1-1 题用图

$$
\begin{cases}
\boldsymbol{a}_1 = \dfrac{a}{2}(\boldsymbol{i}+\sqrt{3}\boldsymbol{j}) \\
\boldsymbol{a}_2 = \dfrac{a}{2}(-\boldsymbol{i}+\sqrt{3}\boldsymbol{j})
\end{cases}
$$

为了确定倒格子基矢，我们假设 $\boldsymbol{a}_3=\boldsymbol{k}$。于是

$$
\begin{cases}
\boldsymbol{a}_2\times\boldsymbol{a}_3 = \dfrac{a}{2}(\sqrt{3}\boldsymbol{i}+\boldsymbol{j}) \\
\boldsymbol{a}_3\times\boldsymbol{a}_1 = \dfrac{a}{2}(-\sqrt{3}\boldsymbol{i}+\boldsymbol{j})
\end{cases}
$$

正格子的原胞体积为

$$
\Omega = \boldsymbol{a}_1\cdot(\boldsymbol{a}_2\times\boldsymbol{a}_3) = \frac{\sqrt{3}}{2}a^2
$$

其倒格子的基矢

$$
\begin{cases}
\boldsymbol{b}_1 = \dfrac{2\pi}{a}\left(\boldsymbol{i}+\dfrac{1}{\sqrt{3}}\boldsymbol{j}\right) \\
\boldsymbol{b}_2 = \dfrac{2\pi}{a}\left(-\boldsymbol{i}+\dfrac{1}{\sqrt{3}}\boldsymbol{j}\right)
\end{cases}
$$

（2）倒格矢 $\boldsymbol{K}_n=n_1\boldsymbol{b}_1+n_2\boldsymbol{b}_2$ 及其长度为

$$
\boldsymbol{K}_n = -[(n_1+n_2)2\pi/a]\boldsymbol{i}+[(n_2-n_1)2\pi/\sqrt{3}a]\boldsymbol{j}
$$

$$
|\boldsymbol{K}_n| = 4\pi(n_1^2+n_2^2+n_1n_2)^{1/2}/\sqrt{3}a
$$

最短倒格矢长度为 $|\boldsymbol{K}_n|_{\min}=4\pi/\sqrt{3}a$，最近邻倒格点共 6 个，它们的 $[n_1,n_2]$ 值分别是

$$
[1,0],[\bar{1},0],[0,1],[0,\bar{1}],[1,\bar{1}],[\bar{1},1]
$$

相应的最短倒格矢为

$$\boldsymbol{K}_{10} = -\frac{2\pi}{a}\boldsymbol{i} - \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}\boldsymbol{j}, \quad \boldsymbol{K}_{\bar{1}0} = \frac{2\pi}{a}\boldsymbol{i} + \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}\boldsymbol{j}$$

$$\boldsymbol{K}_{01} = -\frac{2\pi}{a}\boldsymbol{i} + \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}\boldsymbol{j}, \quad \boldsymbol{K}_{0\bar{1}} = \frac{2\pi}{a}\boldsymbol{i} - \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}\boldsymbol{j}$$

$$\boldsymbol{K}_{1\bar{1}} = -\frac{4\pi}{\sqrt{3}a}\boldsymbol{i}, \qquad \boldsymbol{K}_{\bar{1}1} = \frac{4\pi}{\sqrt{3}a}\boldsymbol{j}$$

由以上最短倒格矢的中垂线围成的正六边形即为第一布里渊区，如图 1 4(b)所示。

显然，第一布里渊区的内切圆半径是最短倒格矢的 1/2，即 $2\pi/\sqrt{3}a$。

**【例 1-2】** 一个二维正方格子：

(1) 能量的极小值在第一布里渊区的中心；

(2) 能量的极大值在第一布里渊区的顶角上。

试在以上两种情况下，分别画出极值附近的等能线，并求出在单位面积的晶体中，能量在 $E\sim(E+\mathrm{d}E)$ 范围内的状态数 $N(E)\mathrm{d}E$。

**解：**

二维正方格子的倒格子和第一布里渊区如图 1-5 所示。

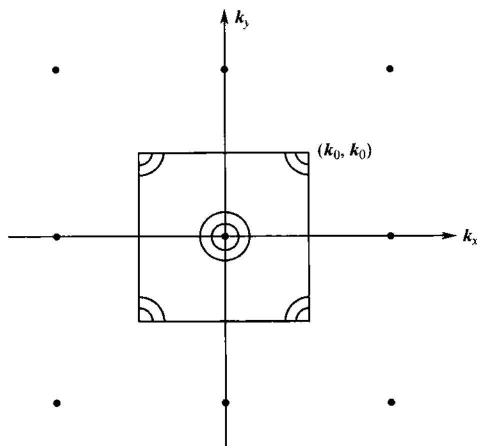



图 1-5　例 1 2 题用图

考虑到电子的自旋可以有两种不同的取向，因而，在单位面积的晶体中，$\boldsymbol{k}$ 空间的状态密度为 $2/(2\pi)^2$。

(1) 极小值在布里渊区中心，在极值附近的等能线是圆，其方程为

$$E(\boldsymbol{k}) = E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n} \tag{1}$$

式中，$m_n$ 是电子的有效质量(标量)。在单位面积的晶体中，在 $k\sim(k+\mathrm{d}k)$ 范围内的状态数

$$N(k)\mathrm{d}k = \frac{2}{(2\pi)^2} \times 2\pi k \mathrm{d}k$$

由式(1)可得出

$$dE = \frac{\hbar^2 k}{m_n} dk$$

或

$$k dk = \frac{m_n}{\hbar^2} dE$$

所以

$$N(E)dE = \frac{m_n}{\pi\hbar^2} dE \tag{2}$$

(2) 极大值在布里渊区顶角上。根据正方格子的对称性，彼此对称的极大值有 4 个，但是它们相互之间只差一个倒格矢，所以独立的极大值只有一个。在极值附近的等能线是圆，其方程为

$$E(\boldsymbol{k}) = E_v - \frac{\hbar}{2m_p}[(k_x - k_0)^2 + (k_y - k_0)^2] \tag{3}$$

设

$$k'_x = k_x - k_0, \qquad k'_y = k_y - k_0$$

则

$$E(\boldsymbol{k}') = E_v - \frac{\hbar^2 (k')^2}{2m_p}$$

$$dE = -\frac{\hbar^2 k'}{m_p} dk' \tag{4}$$

式(4)前面的负号表明，随着 $k'$ 的增加能量减小，在考虑间隔 $dE$ 和 $dk'$ 之间的状态数目时，可以把它去掉。

在单位面积的晶体中，在 $k' \sim (k' + dk')$ 范围内的状态数为

$$N(k')dk' = \frac{2}{(2\pi)^2} \times 2\pi k' dk'$$

利用式(4)，则得

$$N(E)dE = \frac{m_p}{\pi\hbar^2} dE \tag{5}$$

由式(2)和式(5)两式可以看出，在二维情况下，单位能量间隔的状态数与能量 $E$ 无关。

**【例 1-3】** 试求面心立方晶体的第一布里渊区。

**解：** 面心立方晶格基矢为

$$\boldsymbol{a}_1 = \frac{a}{2}(\boldsymbol{j} + \boldsymbol{k}), \qquad \boldsymbol{a}_2 = \frac{a}{2}(\boldsymbol{i} + \boldsymbol{k}), \qquad \boldsymbol{a}_3 = \frac{a}{2}(\boldsymbol{i} + \boldsymbol{j})$$

其倒格子基矢为

$$\boldsymbol{b}_1 = \frac{1}{a}(-\boldsymbol{i} + \boldsymbol{j} + \boldsymbol{k}), \quad \boldsymbol{b}_2 = \frac{1}{a}(\boldsymbol{i} - \boldsymbol{j} + \boldsymbol{k}), \quad \boldsymbol{b}_3 = \frac{1}{a}(\boldsymbol{i} + \boldsymbol{j} - \boldsymbol{k})$$

倒格矢为

$$\boldsymbol{K}_n = \frac{1}{a}[(-n_1+n_2+n_3)\boldsymbol{i}+(n_1-n_2+n_3)\boldsymbol{j}+(n_1+n_2-n_3)\boldsymbol{k}]$$

由 $\boldsymbol{K}_n \cdot \left(k-\frac{\boldsymbol{K}_n}{2}\right)=0$ 得布里渊区边界方程为

$$(-n_1+n_2+n_3)k_x+(n_1-n_2+n_3)k_y+(n_1+n_2-n_3)k_z$$
$$=-\frac{1}{2a}[(-n_1+n_2+n_3)^2+(n_1-n_2+n_3)^2+(n_1+n_2-n_3)^2]$$

离原点最近的倒格点为

$$(111),(11\bar{1}),(1\bar{1}1),(\bar{1}11),(1\bar{1}\bar{1}),(\bar{1}1\bar{1}),(\bar{1}\,11),(\bar{1}\,\bar{1}\,\bar{1})$$

由原点指向上述倒格点的倒格矢的垂直平分面为

$$\pm k_x \pm k_y \pm k_z = \frac{3}{2a}$$

因为这 8 个倒格矢的中垂面围成的正八面体的体积比倒格原胞体积大。所以再考虑邻近的倒格点：

$$(2,0,0),(0,2,0),(0,0,2),(-2,0,0),(0,-2,0),(0,0,-2)$$

到次邻近倒格点的倒格矢的中垂面的 6 个方程为

$$k_x=\pm\frac{1}{a}, k_y=\pm\frac{1}{a}, k_z=\pm\frac{1}{a}$$

这 6 个中垂面和前面 8 个中垂面围成截角八面体(十四面体)。所以面心立方晶体的第一布里渊区为一截角八面体，如图 1-6 所示。

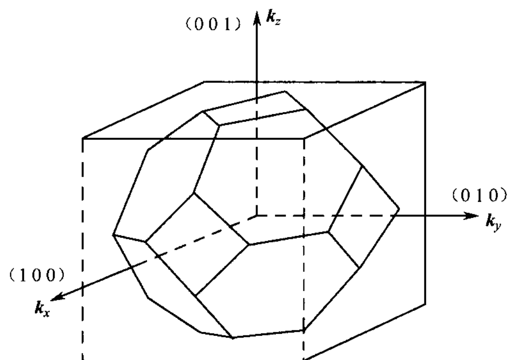



图 1-6　例 1-3 题用图

**【例 1-4】** 试证明面心立方晶格的第一布里渊区的六边形界面起因于(111)原子平面的布喇格反射，四边形界面则起因于(200)原子平面的布喇格反射。

**证明：** 布里渊区界面方程为

$$\boldsymbol{K}_n \cdot \left(\boldsymbol{k}+\frac{\boldsymbol{K}_n}{2}\right)=0$$

它代表能量的不连续面，这些面垂直平分倒格矢 $\boldsymbol{K}_n$；当波长 $\lambda=1/|k|$ 的电子波入射到该面时，遭受到全反射。由于倒格矢 $\boldsymbol{K}_n$ 与对应的面系的晶面间距 $d$ 存在着如下关系

$$d=\frac{1}{|\boldsymbol{K}_n|}$$

故由$|\boldsymbol{K}_n|$的值便可求得 $d$ 值。

面心立方晶格的倒格子是一个边长为 $2/a$ 的体心立方格子，它的第一布里渊区是一个由 8 个六边形面和 6 个正方形面所围成的十四面体(见例 1-3)，布里渊区中心到六边形面的距离等于

$$\frac{|\boldsymbol{K}_n|}{2}=\frac{\sqrt{3}}{4}\left(\frac{2}{a}\right)=\frac{\sqrt{3}}{2a}$$

即

$$|\boldsymbol{K}_n|=\frac{\sqrt{3}}{a}$$

于是

$$d=\frac{1}{|\boldsymbol{K}_n|}=\frac{a}{\sqrt{3}}$$

在立方晶系中，面间距公式为

$$d=\frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$$

而且，在面心立方晶格中，只有面指数 $h$、$k$、$l$ 全为奇数或全为偶数才可能产生反射，因此，当

$$d=\frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}=\frac{a}{\sqrt{3}}$$

时，对应的晶面族为{111}。

同理，对于正方形的界面，$|\boldsymbol{K}_n|=2/a$，$d=a/2$，它对应于{200}面簇的布喇格反射。

**【例 1-5】** 试证明：若只计及最近邻的相互作用，用紧束缚近似方法导出体心立方晶格的 s 态电子的能带为

$$E(\boldsymbol{k})=E_0-A-\delta J(\cos\pi ak_x\cos\pi ak_y\cos\pi ak_z)$$

式中，$J$ 为交叠积分。

**解**：如只计及最近邻的相互作用，采用紧束缚近似处理晶体中的 s 态电子时，其能量由下式确定

$$E(\boldsymbol{k})=E_0-A+\sum_{R_\mathrm{n}}^{\text{最近邻}}\exp(\mathrm{i}2\pi\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{R}_\mathrm{n}-\boldsymbol{R}_\mathrm{s})J_{\mathrm{sn}}) \tag{1}$$

式中，$\boldsymbol{R}_\mathrm{s}$ 和 $\boldsymbol{R}_\mathrm{n}$ 分别是参考原子及其各个最近邻的位矢。在体心立方晶格中，每个原子有 8 个最近邻。若取参考原子为坐标原点，即 $\boldsymbol{R}_\mathrm{s}=0$，则 8 个最近邻的坐标分别为

$$\frac{a}{2}(1,1,1),\quad \frac{a}{2}(1,1,\bar{1}),\quad \frac{a}{2}(1,\bar{1},1),\quad \frac{a}{2}(\bar{1},1,1),$$

$$\frac{a}{2}(1,\bar{1},\bar{1}),\quad \frac{a}{2}(\bar{1},\bar{1},1),\quad \frac{a}{2}(\bar{1},1,\bar{1}),\quad \frac{a}{2}(\bar{1},\bar{1},\bar{1})$$

交叠积分 $J_{sn}$ 对各个最近邻均相等，令 $J_{sn}=-J$，从式(1)便得

$$
\begin{aligned}
E(\boldsymbol{k}) =& E_0 - A - J[\mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi a(k_x+k_y+k_z)} + \mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi a(k_x+k_y-k_z)} + \mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi a(k_x-k_y+k_z)} + \\
& \mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi a(k_x-k_y-k_z)} + \mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi a(-k_x+k_y+k_z)} + \mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi a(-k_x+k_y-k_z)} + \mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi a(-k_x-k_y+k_z)} + \mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi a(-k_x-k_y-k_z)}] \\
=& E_0 - A - 2J[\mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi a(k_x+k_y)}\cos\pi a k_z + \mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi a(k_x-k_y)}\cos\pi a k_z + \\
& \mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi a(-k_x+k_y)}\cos\pi a k_z + \mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi a(-k_x-k_y)}\cos\pi a k_z] \\
=& E_0 - A - 4J[\mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi a k_x}\cos\pi a k_y\cos\pi a k_z + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi a k_x}\cos\pi a k_y\cos\pi a k_z] \\
=& E_0 - A - 8J(\cos\pi a k_x\cos\pi a k_y\cos\pi a k_z)
\end{aligned}
$$

即得证之。

**【例 1-6】** 根据上题结果，试求：

(1) 体心立方晶格的能带宽度；

(2) 能带底部和顶部电子的有效质量；

(3) 画出沿 $k_x$ 方向($k_y=k_z=0$)$E(k_x)$和 $v(k_x)$的曲线。

**解：** 对于体心立方晶格有

$$
E(\boldsymbol{k}) = E_0 - A - 8J(\cos\pi a k_x\cos\pi a k_y\cos\pi a k_z) \tag{1}
$$

(1) 由余弦函数的性质，用观察法即可断定，当 $k_x=k_y=k_z=0$ 时，能带中的能量取最小值，即

$$
E_{\min} = E_0 - A - 8J
$$

当 $k_x=\pm 1/a, k_y=\pm 1/a, k_z=\pm 1/a$ 时，能量取最大值，即

$$
E_{\max} = E_0 - A + 8J
$$

因而能带的宽度

$$
\Delta E = E_{\max} - E_{\min} = 16J
$$

(2) 在能带底附近，$k$ 值很小，利用公式

$$
\cos x = 1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} - \cdots
$$

将 $E(\boldsymbol{k})$展开到 $k$ 的二次项，得

$$
\begin{aligned}
E(\boldsymbol{k}) \approx& E_0 - A - 8J\left[1-\frac{(\pi a k_x)^2}{2}\right]\left[1-\frac{(\pi a k_y)^2}{2}\right]\left[1-\frac{(\pi a k_z)^2}{2}\right] \\
=& E_0 - A - 8J\left[1-\frac{\pi^2 a^2}{2}(k_x^2+k_y^2+k_z^2)\right] \\
=& E_{\min} + 4\pi^2 a^2 J(k_x^2+k_y^2+k_z^2) \\
=& E_{\min} + \frac{h^2}{2m_b^*}(k_x^2+k_y^2+k_z^2) \\
=& E_{\min} + \frac{h^2}{2m_b^*}k^2
\end{aligned}
$$

式中

$$
m_b^* = \frac{h^2}{8\pi^2 a^2 J}
$$

为能带底部电子的有效质量。

在能带顶部附近，$k_x=\pm\frac{1}{a}+\delta k_x$，$k_y=\pm\frac{1}{a}+\delta k_y$，$k_z=\pm\frac{1}{a}+\delta k_z$，代入式(1)并按级数展开，得

$$\begin{aligned}E(\boldsymbol{k}) &= E_0-A-8J[\cos(\pm\pi+\pi a\delta k_x)\cos(\pm\pi+\pi a\delta k_y)\cos(\pm\pi+\pi a\delta k_z)]\\ &= E_0-A+8J[\cos(\pi a\delta k_x)\cos(\pi a\delta k_y)\cos(\pi a\delta k_z)]\\ &\approx E_0-A+8J\left\{1-\frac{(\pi a)^2}{2}[(\delta k_x)^2+(\delta k_y)^2+(\delta k_z)^2]\right\}\\ &= E_{\max}-4\pi^2a^2J[(\delta k_x)^2+(\delta k_y)^2+(\delta k_z)^2]\\ &= E_{\max}+\frac{h^2}{2m_t^*}[(\delta k_x)^2+(\delta k_y)^2+(\delta k_z)^2]\end{aligned}$$

式中

$$m_t^*=-\frac{h^2}{8\pi^2a^2J}$$

为能带顶部电子的有效质量。因为 $J>0$，有 $m_t^*<0$，即能带顶部电子的有效质量为负值。

(3) 当 $k_y=k_z=0$ 时，沿 $k_x$ 方向的能量和速度分别为

$$E(k_x)=E_0-A-8J\cos\pi ak_x$$

$$v(k_x)=\frac{1}{h}\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}k_x}=\frac{8\pi aJ}{h}\sin\pi ak_z$$

$E(\boldsymbol{k}_x)$和$v(\boldsymbol{k}_x)$的曲线如图 1-7 所示。

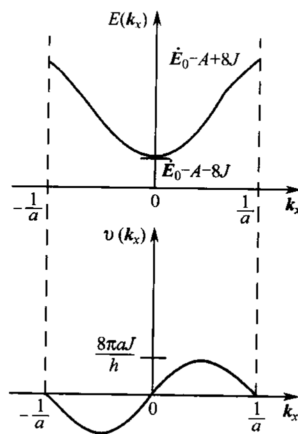



图 1-7　$E(\boldsymbol{k}_x)$和$v(\boldsymbol{k}_x)$的曲线图

**【例 1-7】** 设导带底电子的有效质量倒数张量可以表示为如下形式

$$\begin{pmatrix}a_{xx} & 0 & 0\\ 0 & a_{yy} & a_{yz}\\ 0 & a_{yz} & a_{zz}\end{pmatrix} \tag{1}$$

试求出导带底附近的能谱和有效质量张量的分量。

**解：**(1) 在导带底附近，$E(\boldsymbol{k})$可以展开为泰勒级数(取导带底对应的 $\boldsymbol{k}$ 值为原点，展开到二次项)

$$E(\boldsymbol{k})=E_0+\sum_i\frac{\partial E}{\partial k_i}k_i+\frac{1}{2}\sum_{i,j}\frac{\partial^2E}{\partial k_i\,\partial k_j}k_ik_j$$

由于原点是导带的极小值，所以一次微商为零，取导带底为能量零点，则 $E_0=0$。根据有效质量倒数张量的定义有

$$\frac{1}{m_i\,j}=\hbar^{-2}\frac{\partial^2E}{\partial k_i\,\partial k_j}$$

利用式(1)可得出

$$E(\boldsymbol{k})=\frac{\hbar^2}{2}(a_{xx}k_x^2+a_{yy}k_y^2+a_{zz}k_z^2+2a_{yz}k_yk_z)$$

(2) 倒数张量的分量是

$$(a^{-1})_{ij} = \frac{A_{ji}}{\det a}$$

所以,有效质量张量的分量

$$m_{ij} = \frac{A_{ji}}{\det a} \tag{2}$$

式中 $A_{ji}$ 是 $a_{ij}$ 的余因式,而

$$\det a = a_{xx}(a_{yy}a_{zz} - a_{yz}^2) \tag{3}$$

是$(a)$对应的行列式值。

由式(1)、式(2)和式(3)可得

$$m_{xx} = \frac{1}{a_{xx}}, m_{yy} = \frac{a_{zz}}{a_{yy}a_{zz} - a_{yz}^2}, m_{zz} = \frac{a_{yy}}{a_{yy}a_{zz} - a_{yz}^2},$$

$$m_{yz} = m_{zy} = \frac{-a_{yz}}{a_{yy}a_{zz} - a_{yz}^2}, m_{xy} = m_{xz} = m_{yx} = m_{zx} = 0$$

**【例 1-8】** 试证明,如只考虑最近邻的相互作用,用紧束缚方法导出简单的立方晶体中的 s 态电子的能带为

$$E(\boldsymbol{k}) = E_0 - A - 2J(\cos 2\pi ak_x + \cos 2\pi ak_y + \cos 2\pi ak_z)$$

试求:(1) 能带的宽度($\Delta E = 12J$);

(2) 能带底和能带顶附近电子有效质量。

**解:**(1) 若只计及最近邻的相互作用,用紧束缚近似法处理晶体中的 s 态电子所得结果是

$$E(\boldsymbol{k}) = E_0 - A + \sum_{\boldsymbol{R}_n}^{\text{最近邻}} e^{i2\pi \boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{R}_n - \boldsymbol{R}_s)} J_{sn}$$

式中,$\boldsymbol{R}_s$ 和 $\boldsymbol{R}_n$ 分别是参考原子及其最近邻的位矢。在简单立方晶格中,有 6 个最近邻。如选取 $\boldsymbol{R}_s = 0$,即以参考原子为坐标原点,则这 6 个最近邻的坐标是

$$a(1,0,0),\quad a(\bar{1},0,0),\quad a(0,1,0)$$
$$a(0,\bar{1},0),\quad a(0,0,1),\quad a(0,0,\bar{1})$$

这里 $a$ 是晶格常数。对于 s 态电子,交叠积分对各个最近邻都相等,令 $J_{sn} = -J$,则得

$$\begin{aligned} E(\boldsymbol{k}) &= E_0 - A - J(e^{i2\pi ak_x} + e^{-i2\pi ak_x} + e^{i2\pi ak_y} + e^{-i2\pi ak_y} + e^{i2\pi ak_z} + e^{-i2\pi ak_z}) \\ &= E_0 - A - 2J(\cos 2\pi ak_x + \cos 2\pi ak_y + \cos 2\pi ak_z) \end{aligned}$$

在能带底处,$k_x = k_y = k_z = 0$,对应的能量有最小值:

$$E_{\min} = E_0 - A - 6J$$

在能带顶处,$k_x = \pm 1/2a, k_y = \pm 1/2a, k_z = \pm 1/2a$,对应的能量有最大值:

$$E_{\max} = E_0 - A + 6J$$

因此,能带的宽度为

$$\Delta E = E_{max} - E_{min} = 12J$$

(2) 简单立方晶格中 s 态电子的能带为

$$E(\boldsymbol{k}) = E_0 - A - 2J(\cos 2\pi a k_x + \cos 2\pi a k_y + \cos 2\pi a k_z)$$

能带底对应 $\boldsymbol{k}=0$,可将 $E(\boldsymbol{k})$在 $k=0$ 附近用泰勒级数展开,只取到 $\boldsymbol{k}$ 的二次项,得到

$$\begin{aligned}E(\boldsymbol{k}) &= E_0 - A - 2J\left\{\left[1-\frac{1}{2}(2\pi a k_x)^2\right]+\right.\\&\left.\left[1-\frac{1}{2}(2\pi a k_y)^2\right]+\left[1-\frac{1}{2}(2\pi a k_z)^2\right]\right\}\\&= E_0 - A - 2J\left[3-\frac{1}{2}(2\pi a)^2(k_x^2+k_y^2+k_z^2)\right]\\&= E_0 - A - 6J + 4\pi^2 a^2 J(k_x^2+k_y^2+k_z^2)\\&= E_{min} + \frac{h^2}{2m_b^*}(k_x^2+k_y^2+k_z^2)\end{aligned}$$

式中

$$E_{min} = E_0 - A - 6J$$

为能带底电子的能量,而

$$m_b^* = \frac{h^2}{8\pi^2 a^2 J}$$

为能带底电子的有效质量。

同样,在能带顶附近,$k_i = \pm 1/2a + \delta k_i$,$(i=x,y,z)$,将 $E(\boldsymbol{k})$在$\left(\pm\frac{1}{2a},\pm\frac{1}{2a},\pm\frac{1}{2a}\right)$附近按泰勒级数展开,即

$$\begin{aligned}E(\boldsymbol{k}) &= E_0 - A - 2J[\cos(\pm\pi + 2\pi a\delta k_x) + \cos(\pm\pi + 2\pi a\delta k_y) + \cos(\pm\pi + 2\pi a\delta k_z)]\\&= E_0 - A + 2J(\cos 2\pi a\delta k_x + \cos 2\pi a\delta k_y + \cos 2\pi a\delta k_z)\\&= E_0 - A + 2J\left[3-\frac{1}{2}(2\pi a)^2(\delta k_x^2+\delta k_y^2+\delta k_z^2)\right]\\&= E_{max} - 4\pi^2 a^2 J(\delta k_x^2+\delta k_y^2+\delta k_z^2)\\&= E_{max} + \frac{h^2}{2m_t^*}(\delta k_x^2+\delta k_y^2+\delta k_z^2)\end{aligned}$$

式中

$$E_{max} = E_0 - A + 6J$$

为能带顶处电子的能量,而

$$m_t^* = -\frac{h^2}{8\pi^2 a^2 J}$$

为能带顶处电子的有效质量。因为 $J>0$,则 $m_t^*<0$,即能带顶电子的有效质量为负值。

**【例 1-9】** 某半导体晶体价带顶附近能量 $E$ 可表示为:$E(k)=E_{max}-10^{26}k^2(\text{erg})$,现将其中一波矢 $\boldsymbol{k}=10^7\text{i/cm}$ 的电子移走,试求此电子留下的空穴的有效质量,波矢及速度。

**解:** 由题中条件可知:$E(\boldsymbol{k})=E_{max}-10^{26}(k_x^2+k_y^2+k_z^2)$,显然价带顶附近等能面为球

面，则有效质量为各向同性，即是一标量。

$$\frac{1}{m_n^*}=\frac{1}{h^2}\frac{\partial^2 E}{\partial k^2}$$

所以

$$m_p^* =- m_n^* =- h^2\left(\frac{\partial^2 E}{\partial k^2}\right)^{-1}=(6.62\times10^{-27})^2\times\left(\frac{1}{2\times10^{-26}}\right)=2.2\times10^{-27}(\text{g})$$

由速度 $v(k)=\frac{1}{h}\frac{\partial E}{\partial k}$可得

$$v_x=\frac{1}{h}\frac{\partial E}{\partial k_x}=\frac{1}{h}\times(-2\times10^{-26})k_x$$

$$v_y=\frac{1}{h}\frac{\partial E}{\partial k_y}=\frac{1}{h}\times(-2\times10^{-26})k_y$$

$$v_z=\frac{1}{h}\frac{\partial E}{\partial k_z}=\frac{1}{h}\times(-2\times10^{-26})k_z$$

当 $k=10^7\text{i/cm}$ 时

$$v(k)=-\frac{1}{h}\times(-2\times10^{-26})\times10^7\text{i}=3.02\times10^7\text{i}(\text{cm/s})$$

因为空穴的波矢 $k_p=-k_n$，所以 $k_p=-10^7\text{i/cm}$。

**【例 1-10】** 在一维周期性势场中运动的电子波函数分别具有下面形式：

(1) $\psi_k(x)=\sin\frac{\pi}{a}x$；

(2) $\psi_k(x)=i\cos\frac{3\pi}{a}x$；

(3) $\psi_k(x)=\sum_{l=-\infty}^{\infty}f(x-la)$；

(4) $\psi_k(x)=\sum_{l=-\infty}^{\infty}(-1)^l f(x-la)$。

这里 $a$ 是一维晶格的晶格常数，$f(x)$是某个确定的函数，试用布洛赫定理指出上述各种情形下的波矢 $\boldsymbol{k}$ 值。

**解：**根据布洛赫定理在一维周期性势场中运动的电子应满足下式

$$\psi_k(x+a)=\mathrm{e}^{ika}\psi_k(x)$$

因此，有

(1)
$$\psi_k(x+a)=\sin\left[\frac{\pi}{a}(x+a)\right]=\sin\left(\frac{\pi}{a}x+\pi\right)$$

$$=-\sin\left(\frac{\pi}{a}x\right)=-\psi_k(x)=\mathrm{e}^{ika}\psi_k(x)$$

所以，$\mathrm{e}^{ika}=-1$；即

$$k=\pm\frac{\pi}{a},\pm\frac{3\pi}{a},\pm\frac{5\pi}{a},\cdots$$

若只取简约布里渊区内的值，$-\frac{\pi}{a}<k\leqslant\frac{\pi}{a}$，则 $k=\pi/a$。

(2)
$$\psi_k(x+a)=\mathrm{i}\cos\left[\frac{3\pi}{a}(x+a)\right]=\mathrm{i}\cos\left[\frac{3\pi}{a}x+3\pi\right]$$
$$=-\mathrm{i}\cos\frac{3\pi}{a}x=-\psi_k(x)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}\psi_k(x)$$

所以，$\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}=-1$；即

$$k=\pm\frac{\pi}{a},\pm\frac{3\pi}{a},\pm\frac{5\pi}{a},\cdots$$

简约布里渊区内的值为 $k=\pi/a$。

(3)
$$\psi_k(x+a)=\sum_{l=-\infty}^{\infty}f(x+a-la)=\sum_{l=-\infty}^{\infty}f[x-(l-1)a]$$

令
$$l'=l-1,(l=l'+1)$$
$$\psi_k(x+a)=\sum_{l'=-\infty}^{\infty}f(x-l'a)=\psi_k(x)=l^{lka}\psi_k(x)$$

所以，$\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}=1$；即

$$k=0,\pm\frac{2\pi}{a},\pm\frac{4\pi}{a},\pm\frac{6\pi}{a},\cdots$$

简约布里渊区内的值为 $k=0$。

(4)
$$\psi(x+a)=\sum_{l=-\infty}^{\infty}(-1)^l f(x+a-la)$$
$$=\sum_{l=-\infty}^{\infty}(-1)^l f[x+(l-1)a]$$

令
$$l'=l-1,(l=l'+1)$$
$$\psi_k(x+a)=\sum_{l'=-\infty}^{\infty}(-1)^{l'+1}f(x-l'a)=-\psi_k(x)$$
$$=\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}\psi_k(x)$$

所以，$\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}=-1$；即

$$k=\pm\frac{\pi}{a},\pm\frac{3\pi}{a},\pm\frac{5\pi}{a},\cdots$$

简约布里渊区内的值为 $k=\pi/a$。

**【例 1-11】** 在各向异性晶体中，其能量 $E$ 可用波矢 $\boldsymbol{k}$ 的分量表示成

$$E(k)=Ak_x^2+Bk_y^2+Ck_z^2$$

试求出可代替牛顿方程 $F=m_0\frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t^2}$ 的电子运动方程。

**解：** 因为电子的运动速度可表示成

$$v=\frac{1}{h}\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}k}$$

所以电子加速度为

$$\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{h}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}k}\right)=\frac{1}{h}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}k}\cdot\left(\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}t}\right)$$

由于单位时间内能量增加等于力在单位时间内所做的功为

$$\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}t}=F\cdot\frac{\mathrm{d}s}{\mathrm{d}t}=F\cdot v=F\cdot\frac{1}{h}\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}k}$$

所以

$$\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{h^2}F\cdot\frac{\mathrm{d}^2E}{\mathrm{d}k^2}=\frac{1}{h^2}\frac{\mathrm{d}^2E}{\mathrm{d}k^2}\cdot F$$

令$\frac{1}{h^2}\frac{\mathrm{d}^2E}{\mathrm{d}k^2}=\frac{1}{m_{\mathrm{n}z}^*}$按题中所给条件:$E(h)=Ak_x^2+Bk_y^2+Ck_z^2$ 得

$$\frac{1}{m_{\mathrm{n}x}^*}=\frac{2A}{h^2};\qquad \frac{1}{m_{\mathrm{n}y}^*}=\frac{2B}{h^2};\qquad \frac{1}{m_{\mathrm{n}z}^*}=\frac{2C}{h^2}$$

于是

$$\frac{\mathrm{d}v_x}{\mathrm{d}t}=\frac{2A}{h^2}F_x;\qquad \frac{\mathrm{d}v_y}{\mathrm{d}t}=\frac{2B}{h^2}F_y;\qquad \frac{\mathrm{d}v_z}{\mathrm{d}t}=\frac{2C}{h^2}F_z$$

或者写成

$$F_x=\frac{h^2}{2A}\frac{\mathrm{d}v_x}{\mathrm{d}t};\qquad F_y=\frac{h^2}{2B}\frac{\mathrm{d}v_y}{\mathrm{d}t};\qquad F_z=\frac{h^2}{2C}\frac{\mathrm{d}v_z}{\mathrm{d}t}$$

上式即为各向异性晶体中电子的运动方程。

**【例 1-12】** 试证明:在晶体中

(1) 电子的本征能量 $E_{\mathrm{n}}(k)$是 $k$ 的偶函数,即

$$E_{\mathrm{n}}(-k)=E_{\mathrm{n}}(k)$$

(2) 在布里渊区的边界处,即在 $k_0=\frac{\pi}{a}n(n=\pm1,\pm2,\cdots)$处

$$v_{\mathrm{n}}(k_0)=0$$

**解:** (1) 在一维周期性势场中,电子波函数满足下面的薛定谔方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+V(x)\right]\psi_{nk}(x)=E_{\mathrm{n}}(k)\psi_{nk}(x)\tag{1}$$

这里$V(x)$是周期性势场,如果对上面方程的等式两边都取复共轭,因为势场$V(x)$是个实数,所以

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+V(x)\right]\psi_{nk}^*(x)=E_{\mathrm{n}}(k)\psi_{nk}^*(x)\tag{2}$$

这说明 $\psi_{nk}^*(x)$与 $\psi_{nk}(x)$是相应于同一能量本征值 $E_{\mathrm{n}}(k)$的两个本征波函数。因为在周期势场中运动的电子波函数满足布洛赫定理,故可写成

$$\psi_{nk}(x)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}U_{nk}(x)\tag{3}$$

因此,相应地

$$\psi_{nk}^*(x) = e^{-ikx}U_{nk}^*(x) \tag{4}$$

这里 $U_{nk}(x)$ 及 $U_{nk}^*(x)$ 均是 $x$ 的周期函数，即

$$U_{nk}(x+a) = U_{nk}(x) \tag{5}$$

$$U_{nk}^*(x+a) = U_{nk}^*(x) \tag{6}$$

根据布洛赫定理

$$\psi_{nk}(x+a) = e^{ika}\psi_{nk}(x) \tag{7}$$

而由式(4)，可得

$$\psi_{nk}^*(x+a) = e^{\ ika}e^{-ika}U_{nk}^*(x) = e^{-ika}\psi_{nk}^*(x) \tag{8}$$

比较式(7)及式(8)，可知

$$\psi_{nk}^*(x) = \psi_{n_1-k}(x) = e^{-ika}U_{n_1-k}(x) \tag{9}$$

而对于 $\psi_{n_1-k}(x)$，它应满足薛定谔方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)\right]\psi_{n_1\ \cdot k}(x) = E_n(-k)\psi_{n_1\ \ k}(x) \tag{10}$$

根据式(9)，式(10)也可写成

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)\right]\psi_{nk}^*(x) = E_n(-k)\psi_{nk}^*(x)$$

比较式(2)及式(11)，可知

$$E_a(-k) = E_n(k) \tag{11}$$

这一结论对三维晶体，也同样成立，即

$$E_n(-\boldsymbol{k}) = E_n(\boldsymbol{k}) \tag{12}$$

(2) 由于 $E_n(k)$ 是 $k$ 的周期函数，即

$$E_n(k+K_n) = E_n(k) \tag{13}$$

$$K_n = \frac{2\pi}{a}n\ (n=\pm1,\pm2,\cdots) \tag{14}$$

因此，晶体电子的速度也是 $k$ 的周期函数。

$$v_n(k+K_n) = \frac{1}{\hbar}\frac{d}{dk}E_n(k+K_n) = \frac{1}{\hbar}\frac{d}{dk}E_n(k) = v_n(k) \tag{15}$$

式(15)也可写成

$$v_n(-k+K_n) = v_n(-k) \tag{16}$$

因为晶体中电子的速度是 $k$ 的奇函数，即 $v_n(-k)=-v_n(k)$，故式(16)又可写成

$$v_n(-k+K_n) =- v_n(k) \tag{17}$$

令 $k=k_0=\frac{\pi}{a}h$，并考虑到式(18)，则

$$v_n\left(-\frac{\pi}{a}n+\frac{2\pi}{a}n\right) =- v_n\left(\frac{\pi}{a}n\right)$$

即

$$v_n\left(\frac{\pi}{a}n\right) =- v_n\left(\frac{\pi}{a}n\right)$$

所以

$$v_n(k_0) = v_n\left(\frac{\pi}{a}k\right) = 0 \tag{18}$$

在三维情况下，晶体电子的平均速度应是

$$v_n(\boldsymbol{k}) = \frac{1}{\hbar}\nabla E_n(\boldsymbol{k}) \tag{19}$$

**【例 1-13】** 证明：对于能带中的电子，$\boldsymbol{k}$ 状态和 $-\boldsymbol{k}$ 状态的电子速度大小相等，方向相反，即 $v(\boldsymbol{k})=-v(-\boldsymbol{k})$。并解释为什么无外场时，晶体总电流等于零。

**解：** $\boldsymbol{k}$ 状态电子的速度为

$$v(\boldsymbol{k}) = \frac{1}{h}\left[\frac{\partial E(k)}{\partial k_x}i + \frac{\partial E(k)}{\partial k_y}j + \frac{\partial E(k)}{\partial k_z}k\right] \tag{1}$$

同理，$-\boldsymbol{k}$ 状态电子的速度则为

$$v(-\boldsymbol{k}) = \frac{1}{\boldsymbol{h}}\left[\frac{\partial E(-k)}{\partial k_x}i + \frac{\partial E(-k)}{\partial k_y}j + \frac{\partial E(-k)}{\partial k_z}k\right] \tag{2}$$

从一维情况容易看出

$$\frac{\partial E(-k)}{\partial k_x} = -\frac{\partial E(k)}{\partial k_x} \tag{3}$$

同理有

$$\frac{\partial E(-k)}{\partial k_y} = -\frac{\partial E(k)}{\partial k_y} \tag{4}$$

$$\frac{\partial E(-k)}{\partial k_z} = -\frac{\partial E(k)}{\partial k_z} \tag{5}$$

将式(3)、式(4)、式(5)代入式(2)后得

$$v(-k) = -\frac{1}{h}\left[\frac{\partial E(k)}{\partial k_x}i + \frac{\partial E(k)}{\partial k_y}j + \frac{\partial E(k)}{\partial k_z}k\right] \tag{6}$$

利用式(1)即得

$$v(-\boldsymbol{k}) = -v(\boldsymbol{k})$$

讨论总电流：在没有外电场时，在一定温度下，电子占有某个状态的概率只同该状态的能量有关。由于 $E(\boldsymbol{k})=E(-\boldsymbol{k})$，电子占有 $\boldsymbol{k}$ 状态的概率同 $-\boldsymbol{k}$ 状态的概率相同。因此，这两个状态电子的电流相互抵消。这样，在电子充满和不充满的能带中，成对的电子的电流均抵消，使晶体中总电流为零。如图 1-8 所示。

当有外电场 $\mathscr{E}$ 时，外力 $\boldsymbol{F}=-q\mathscr{E}$，则 $\mathrm{d}\boldsymbol{k}/\mathrm{d}t=\boldsymbol{F}/h=-q\mathscr{E}/h$。在布里渊区，状态的分布是均匀的，此时所有的电子都以相同速度($-q\mathscr{E}/h$)移动。

对于电子充满的能带，电子的能量和速度分布如图 1-9(a)所示。电子运动并不改变布里渊区内电子分布的情况，由该区一边出去，另一边却同时进来。故即使有电场，晶体中也没有电流。

对于未充满的能带，由于电场的作用，电子在布里渊区中的分布是不对称的，总电流

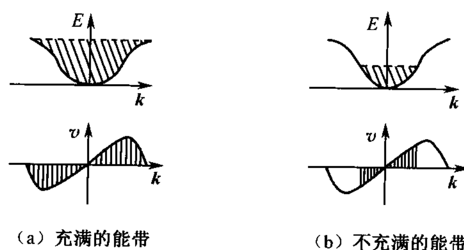



图 1 8　无外电场时，电子能量 $E$ 和速度 $v$ 的示意图

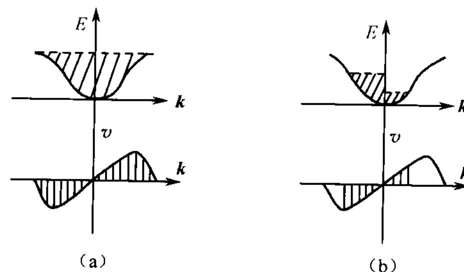



图 1-9　有外电场时，电子占据的能量和速度示意图

不为零。即在不满的能带中，由于电子的运动，可以产生电流。

**【例 1-14】** 已知一维晶体的电子能带可写成

$$E(k) = \frac{h^2}{m_0 a^2}\left(\frac{7}{8} - \cos 2\pi ka + \frac{1}{8}\cos 6\pi ka\right)$$

式中，$a$ 为晶格常数。试求：

(1) 能带的宽度；

(2) 电子的波矢 $k$ 状态时的速度；

(3) 能带底部和顶部电子的有效质量。

**解：**(1) 由 $E(k)$关系得

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}k} &= \frac{\pi h^2}{m_0 a^2}\left(2\sin 2\pi ka - \frac{3}{4}\sin 6\pi ka\right)\\ &= \frac{\pi h^2}{m_0 a}\left[2\sin 2\pi ka - \frac{3}{4}(3\sin 2\pi ka - 4\sin^3 2\pi ka)\right]\\ &= \frac{\pi h^2}{m_0 a}\left(3\sin^3 2\pi ka - \frac{1}{4}\sin 2\pi ka\right)\end{aligned} \tag{1}$$

$$\frac{\mathrm{d}^2 E}{\mathrm{d}k^2} = \frac{\pi^2 h^2}{m_0}\left(18\sin^2 2\pi ka\ \cos 2\pi ka - \frac{1}{2}\cos 2\pi ka)\right) \tag{2}$$

令 $\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}k}=0$，得：$\sin^2 2\pi ka = \frac{1}{12}$，所以

$$\cos 2\pi ka = \pm\left(\frac{11}{12}\right)^{\frac{1}{2}}$$

当 $\cos 2\pi ka=\sqrt{\frac{11}{12}}$时，代入式(2)得

$$\frac{\mathrm{d}^2E}{\mathrm{d}k^2}=\frac{\pi^2h^2}{m_0}\left(18\times\frac{1}{12}\times\sqrt{\frac{11}{12}}-\frac{1}{2}\times\sqrt{\frac{11}{12}}\right)=\sqrt{\frac{11}{12}}\,\frac{\pi h^2}{m_0}>0$$

对应 $E(k)$的极小值。

当 $\cos 2\pi ka=-\sqrt{\frac{11}{12}}$时，代入式(2)得

$$\frac{\mathrm{d}^2E}{\mathrm{d}k^2}=\frac{\pi h^2}{m_0}\left(-18\times\frac{1}{12}\times\sqrt{\frac{11}{12}}+\frac{1}{2}\times\sqrt{\frac{11}{12}}\right)=-\sqrt{\frac{11}{12}}\,\frac{\pi^2h}{m_0}<0$$

对应 $E(k)$的极大值。

根据上述结果，求得 $E_{\min}$和 $E_{\max}$即可求得能带宽度。

因为

$$\begin{aligned}E(k)&=\frac{h^2}{m_0a^2}\left(\frac{7}{8}-\cos 2\pi ka+\frac{1}{8}\cos 6\pi ka\right)\\&=\frac{h^2}{m_0a^2}\left[\frac{7}{8}-\cos 2\pi ka+\frac{1}{8}(4\cos^3\pi ka-3\cos 2\pi ka)\right]\\&=\frac{h^2}{m_0a^2}\left(\frac{7}{8}-\frac{11}{8}\cos 2\pi ka+\frac{1}{2}\cos^3 2\pi ka\right)\end{aligned}$$

将 $\cos 2\pi ka=\sqrt{\frac{11}{12}}$代入得

$$\begin{aligned}E_{\min}&=\frac{h^2}{m_0a^2}\left[\frac{7}{8}-\frac{11}{8}\left(\sqrt{\frac{11}{12}}\right)^3\right]\\&=\frac{h^2}{m_0a^2}\left[\frac{7}{8}-\left(\frac{11}{12}\right)^{\frac{3}{2}}\right]\end{aligned}$$

将 $\cos 2\pi ka=-\sqrt{\frac{11}{12}}$代入得

$$\begin{aligned}E_{\max}&=\frac{h^2}{m_0a^2}\left[\frac{7}{8}+\frac{11}{8}\sqrt{\frac{11}{12}}-\frac{1}{2}\left(\sqrt{\frac{11}{12}}\right)^3\right]\\&=\frac{h^2}{m_0a^2}\left[\frac{7}{8}+\left(\frac{11}{12}\right)^{\frac{3}{2}}\right]\end{aligned}$$

故：能带宽度为

$$\Delta E=E_{\max}-E_{\min}=2\left(\frac{11}{12}\right)^{\frac{3}{2}}\times\frac{h^2}{m_0a^2}$$

(2) 由题中所给 $E(k)$关系可得电子在波矢 $\boldsymbol{k}$ 状态时的速度为

$$v(\boldsymbol{k})=\frac{1}{h}\,\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}k}=\frac{1}{h}\,\frac{\pi h^2}{m_0a^2}\left(3\sin^3 2\pi ka-\frac{1}{4}\sin 2\pi ka\right)$$

$$=\frac{\pi h}{m_0 a^2}\left(3\sin^3 2\pi ka-\frac{1}{4}\sin 2\pi ka\right)$$

(3) 能带底部和顶部电子有效质量

$$(m_n^*)_{带底}=\left[\frac{1}{h^2}\left(\frac{d^2E}{dk^2}\right)_{底}\right]^{-1}=\left[\frac{1}{h^2}\sqrt{\frac{11}{12}}\frac{\pi^2k^2}{m}\right]^{-1}$$

$$=4\left(\frac{12}{11}\right)^{\frac{1}{2}}m_0=4.18m_0$$

$$(m_n^*)_{带顶}=\left[\frac{1}{h^2}\left(\frac{d^2E}{dk^2}\right)_{顶}\right]^{-1}=\left[\frac{1}{h^2}\left(-\sqrt{\frac{11}{12}}\frac{\pi^2h^2}{m_0}\right)\right]^{-1}$$

$$=-4\left(\frac{12}{11}\right)^{\frac{1}{2}}m_0=-4.18m_0$$

**【例 1-15】** 晶格常数为 2.5Å 的一维晶格，当外加 $10^2$V/m 和 $10^7$V/m 电场时，试分别计算电子自能带底运动到能带顶所需时间。(1Å=10nm=$10^{-10}$m)

**解**：设电场强度为 $E$。因为

$$F=h\frac{dk}{dt}=qE(取绝对值)$$

所以

$$dt=\frac{h}{qE}dk$$

故

$$t=\int_0^t dt=\int_0^{\frac{1}{2a}}\frac{h}{qE}dk=\frac{h}{qE}\frac{1}{2a}$$

代入数据得

$$t=\frac{6.62\times10^{-34}}{2\times1.6\times10^{-19}\times2.5\times10^{-10}\times E}=\frac{8.3\times10^{-6}}{E}(s)$$

当：$E=10^2$V/m 时，$t=8.3\times10^{-8}$(s)；

$E=10^7$V/m 时，$t=8.3\times10^{-13}$(s)。

**【例 1-16】** 硅的导带沿〈100〉方向共有 6 个极小值，在极小值附近等能面为旋转椭球面[如图 1-10(a)所示]。其横向和纵向有效质量各为 $m_t\approx0.19m_0$，$m_l\approx0.98m_0$，$m_0$ 为自由电子静质量。

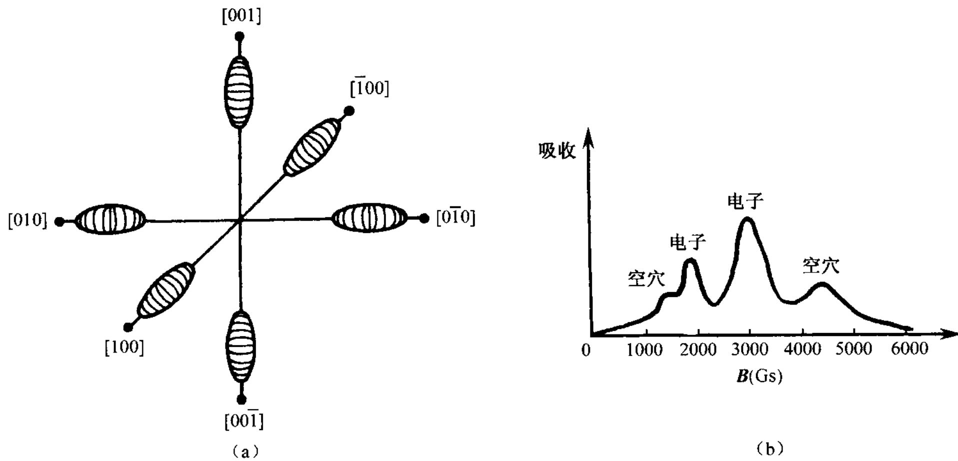
当外磁场在(110)平面内并与[001]方向成 30°角时，测得的硅单晶的回旋共振信号如图 1-10(b)所示，电子的两个共振吸收峰的位置在 0.2950T 和 0.19T 处，试对照图 1-10。

(1) 解释虽然硅沿〈100〉方向有 6 个极小值，椭球却只有两个电子回旋共振吸收峰。

(2) 证明图 1-10(b)给出的吸收峰位置与上面给出的 $m_t$、$m_l$ 值及公式

$$\omega_c=\frac{eB}{m^*},\quad m^*=\left(\frac{m_1m_2m_3}{m_1\alpha^2+m_2\beta^2+m_3\gamma^2}\right)^{\frac{1}{2}}\tag{1}$$

是相符的。式中，$m_1$、$m_2$、$m_3$ 是椭球等能面 3 个主轴方向有效质量；$\alpha$、$\beta$、$\gamma$ 是磁感应强度 $\boldsymbol{B}$ 相对于椭球主轴的 3 个方向余弦。




注：1T(特斯拉)－$10^4$Gs(高斯)

图 1-10　例 1-16 题用图

**解：**(1) 因磁感应强度 $\boldsymbol{B}$ 在(110)平面内并与[001]方向成 30°角，故 $\boldsymbol{B}$ 在 $x$、$y$、$z$ 轴的投影分量分别是 $B\sin30°\cos45°$，$B\sin30°\cos45°$，$B\cos30°$，即 $\boldsymbol{B}$ 的单位矢量 $\hat{\boldsymbol{B}}$ 在 $x$、$y$、$z$ 轴上分量分别为

$$\hat{\boldsymbol{B}} = \left(\frac{1}{2}\times\frac{\sqrt{2}}{2}, -\frac{1}{2}\times\frac{\sqrt{2}}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}\right)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{8}}(1, -1, \sqrt{6}) \tag{2}$$

取 $k_1$、$k_2$、$k_3$ 为 3 个直角坐标轴，并令 $k_3$ 轴沿椭球长轴方向(即沿[100]方向)，再适当选取 $k_1$ 轴方向，使 $\boldsymbol{B}$ 位于($k_1$，$k_3$)平面内并与椭球长轴交角为 $\theta$，则在($k_1$、$k_2$、$k_3$)直角坐标系中，$\boldsymbol{B}$ 的 3 个方向余弦分别为

$$\alpha = \sin\theta, \quad \beta = 0, \quad \gamma = \cos\theta$$

再令 $m_1 = m_2 = m_t$ · $m_3 = m_l$ 则式(1)化为

$$m^* = \left[\frac{m_1 m_2 m_3}{m_1\alpha^2 + m_2\beta^2 + m_3\gamma^2}\right]^{1/2} = \left[\frac{m_t^2 m_l}{m_t\sin^2\theta + m_l\cos^2\theta}\right]^{1/2} \tag{3}$$

对于沿 $x$ 轴方向([100]和[$\bar{1}$00])的一对旋转椭球，由式(2)知 $\cos\theta = \hat{\boldsymbol{B}}_x = \pm 1/\sqrt{8}$，得 $\cos^2\theta = 1/8$，$\sin^2\theta = 7/8$，代入式(3)得

$$m_1^* = \left(\frac{m_t^2 m_l}{7m_t/8 + m_l/8}\right)^{1/2} \tag{4}$$

对于沿 $y$ 轴方向([010]和[0$\bar{1}$0])的一对旋转椭球，由式(2)知 $\cos\theta = \hat{\boldsymbol{B}}_y = \pm 1/\sqrt{8}$，也得 $\cos^2\theta = 1/8$，$\sin^2\theta = 7/8$，代入式(3)得 $m_2^* = m_1^*$。

对于沿 $z$ 轴方向([001]和[00$\bar{1}$])的一对旋转椭球，由式(2)知 $\cos\theta = \hat{\boldsymbol{B}}_z = \pm\sqrt{3}/2$，得

$\cos^2\theta=3/4$，$\sin^2\theta=1/4$，代入式(3)得

$$m_3^* = \left(\frac{m_t^2 m_l}{m_t/4+3m_l/4}\right)^{1/2} \tag{5}$$

综上，因为只有两个不同的 $\cos^2\theta$ 值，即只有两个不同的 $m^*$ 值，所以只能出现两个不同的回旋共振吸收峰。

(2) 将 $m_l=0.98m_0$，$m_t=0.19m_0$ 代入式(4)解得 $m_1^*=0.35m_0$，与之相应的磁感应强度是

$$\begin{aligned} B_1 &= \omega m_1^*/\mathrm{e} = 2\pi v m_1^*/\mathrm{e} \\ &= 2\pi\times 2.4\times 10^{10}\times 0.35\times 9.1\times 10^{-31}/1.6\times 10^{-19} \\ &= 0.3001(\mathrm{T}) = 3001(\mathrm{Gs}) \end{aligned}$$

同理可得 $m_3^*=0.213m_c$，与之相应的磁感应强度是

$$B_2 = \omega m_3^*/\mathrm{e} = 2\pi v m_3^*/\mathrm{e} = 0.1823(\mathrm{T}) = 1823(\mathrm{Gs})$$

计算所得 $B_1$、$B_2$ 值与题给共振吸收峰位置相当接近。

**【例 1-17】** 如果 n 型半导体导带极值在[110]轴上及相应对称方向上，回旋共振实验结果应如何？

**解：** 根据立方对称性，应有下列 12 个方向上的旋转椭球面，即

$[110]$，$[101]$，$[011]$，$[\bar{1}\bar{1}0]$，$[\bar{1}0\bar{1}]$，$[0\bar{1}\bar{1}]$

$[1\bar{1}0]$，$[10\bar{1}]$，$[01\bar{1}]$，$[\bar{1}10]$，$[\bar{1}0\bar{1}]$，$[0\bar{1}1]$

则由解析几何定理得，$\boldsymbol{B}$ 与 $k_3$ 的夹角余弦 $\cos\theta$ 为

$$\cos\theta = \frac{b_1k_1+b_2k_2+b_3k_3}{\sqrt{b_1^2+b_2^2+b_3^2}\times\sqrt{k_1^2+k_2^2+k_3^2}}$$

式中，$B=b_1i+b_2j+b_3k$。

对不同方向的旋转椭球面取不同的一组$(k_1,k_2,k_3)$。

(1) 若 $\boldsymbol{B}$ 沿(111)方向，则 $\cos\theta$ 可以取两组数。

对$[1\bar{1}0]$，$[\bar{1}\bar{1}0]$，$[101]$，$[\bar{1}0\bar{1}]$，$[0\bar{1}1]$，$[01\bar{1}]$方向的旋转椭球得

$$\cos\theta = \sqrt{\frac{2}{3}}$$

对$[1\bar{1}0]$，$[\bar{1}10]$，$[\bar{1}01]$，$[10\bar{1}]$，$[0\bar{1}1]$，$[01\bar{1}]$方向的旋转椭球得

$$\cos\theta = 0$$

所以，当 $\cos\theta=\sqrt{\frac{2}{3}}$ 时，$\cos^2\theta=\frac{2}{3}$，$\sin^2\theta=\frac{1}{3}$。

又因为 $m_n=m_t\sqrt{\frac{m_l}{m_t\sin^2\theta+m_l\cos^2\theta}}$，故

$$m_n^* = \sqrt{\frac{3m_l}{m_t+2m_l}}\cdot m_t$$

当 $\cos\theta=0$ 时，$\cos^2\theta=0$，$\sin^2\theta=1$。

同理得

$$m_n^* = \sqrt{m_l m_t}$$

由 $\omega_c = q\boldsymbol{B}/m_n^*$ 可知，当 $\boldsymbol{B}$ 沿(111)方向时应有两个共振吸收峰。

(2) 若 $\boldsymbol{B}$ 沿[110]方向，则 $\cos\theta$ 可以取三组数。

对[110]，$[\bar{1}\,\bar{1}0]$方向旋转椭球，$\cos\theta=1$；对$[1\bar{1}0][\bar{1}10]$方向旋转椭球，$\cos\theta=0$；对[011]，$[0\bar{1}\,1]$，$[01\bar{1}]$，$[0\bar{1}\,\bar{1}]$，[101]，$[\bar{1}0\bar{1}]$，$[10\bar{1}]$，$[\bar{1}01]$方向旋转椭球，$\cos\theta=\dfrac{1}{2}$。

当 $|\cos\theta|=1$ 时：$\cos^2\theta=1$，$\sin^2\theta=0$；得：$m_n^* = m_t$。

当 $|\cos\theta|=0$ 时：$\cos^2\theta=0$，$\sin^2\theta=1$；得：$m_n^* = \sqrt{m_l m_t}$。

当 $|\cos\theta|=\dfrac{1}{2}$ 时：$\cos^2\theta=\dfrac{1}{4}$，$\sin^2\theta=\dfrac{4}{3}$；得：$m_n^* = m_t\sqrt{\dfrac{4m_l}{3m_t+m_l}}$。故，应有三个吸收峰。

(3) 若 $\boldsymbol{B}$ 沿[100]方向，则 $\cos\theta$ 可以取两组数。

对[110]，$[\bar{1}10]$，$[1\bar{1}0]$，$[\bar{1}\,\bar{1}0]$，$[\bar{1}01]$，$[10\bar{1}]$，$[\bar{1}0\bar{1}]$，[101]方向上旋转椭球得

$$|\cos\theta| = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

对[011]，$[0\bar{1}1]$，$[01\bar{1}]$，$[0\bar{1}\bar{1}]$方向上的旋转椭球得

$$|\cos\theta| = 0$$

当 $|\cos\theta|=\dfrac{1}{\sqrt{2}}$时：$\cos^2\theta=\dfrac{1}{2}$，$\sin^2\theta=\dfrac{1}{2}$，得：$m_n^* = m_t t\sqrt{\dfrac{2m_l}{m_t+m_l}}$；

当 $\cos\theta=0$ 时：$\cos^2\theta=0$，$\sin^2\theta=1$，得：$m_n^* = \sqrt{m_l m_t}$。

所以应有两个共振吸收峰。

(4) $\boldsymbol{B}$ 沿空间任意方向时，$\cos\theta$ 最多可有 6 个不同值，故可以求 6 个 $m_n^*$，所以应有 6 个共振吸收峰。

# 第 2 章　半导体中的杂质和缺陷能级

**主题词：**

浅能级杂质，深能级杂质，施主杂质和 n 型半导体，受主杂质和 p 型半导体，杂质电离，电离能，杂质的补偿，杂质浓度，缺陷、位错能级。

## 2.1　理论概要与重点分析

(1) 在纯净的半导体中掺入少量其他元素杂质，对半导体性能有很大影响。根据杂质原子在晶体中存在的位置，可分为间隙式和替位式两种。后者在半导体中应用较多。由于杂质的存在，使该处的周期性势场受到扰乱，因而杂质的电子不可能处于正常的导带和价带中，而是在禁带中引入等高的分立能级，即杂质能级。根据杂质能级在禁带中所处的位置不同，分为深能级杂质和浅能级杂质。又根据杂质电离后施放电子还是空穴，分为施主和受主杂质两类。

(2) 杂质原子电离后，向导带提供电子，而自身成为不可移动的带正电离子，使半导体成为 n 型，这种杂质称为施主杂质；杂质原子电离后，接收价带中电子，使价带中增加空穴，成为 p 型半导体，而自身成为不可移动的带负电的离子，这种杂质称为受主杂质。

如果施、受主能级分别离导带底和价带顶很近，电离能很小，在常温下杂质基本全部电离，使导带或价带增加电子或空穴，这些杂质称浅能级杂质，它的重要作用是改变半导体的导电类型和调节半导体的导电能力。如Ⅳ族元素半导体中Ⅲ、Ⅴ族杂质和大多数Ⅲ-Ⅴ族半导体中的Ⅱ、Ⅵ族杂质，大都成为重要的浅能级杂质而得到使用。

(3) 浅能级杂质的电离能可以通过类氢原子模型进行估算，经修正后施主杂质电离能可表示为

$$\Delta E_{\mathrm{D}}=\frac{m_{\mathrm{n}}^{*}}{m_{0}}\frac{E_{0}}{\varepsilon_{\mathrm{r}}^{2}} \tag{2.1}$$

受主杂质的电离能可表示为

$$\Delta E_{\mathrm{A}}=\frac{m_{\mathrm{p}}^{*}}{m_{0}}\frac{E_{0}}{\varepsilon_{\mathrm{r}}^{2}} \tag{2.2}$$

式中，$E_0=13.6\mathrm{eV}$ 为氢原子基态电离能；$\varepsilon_{\mathrm{r}}$ 为半导体的相对介电常数；$m_{\mathrm{n}}^{*}$，$m_{\mathrm{p}}^{*}$ 分别为电子和空穴的电导有效质量。

(4) 半导体中同时掺入施主和受主杂质，它们具有相互补偿的作用，施主能级上的电子会落入受主能级上，使两者均被电离，但不会给导带和价带提供电子和空穴。补偿的程度由施、受主杂质浓度来确定：$(N_{\mathrm{D}}-N_{\mathrm{A}})>0$，成为含有受主的 n 型半导体；$(N_{\mathrm{D}}-N_{\mathrm{A}})<0$

成为含有施主的 p 型半导体；$N_D \approx N_A$ 为重补偿情况，与本征半导体相似，但若两者的浓度均很高，会对半导体质量产生严重影响。

用杂质补偿的办法，往往是借以改变半导体导电类型作为制造各种半导体器件的基础。

(5) 一般非Ⅲ、Ⅴ族元素在Ⅳ族元素半导体中，非Ⅱ、Ⅵ族元素在Ⅲ-Ⅴ族化合物半导体中，它们在禁带中引入的能级，施主离导带底较远，受主离价带顶较远，在常温下它们不能达到强电离，称它们为深能级杂质。深能级杂质既可引入施主又可引入受主，同时还可能发生多重电离。它的掺入不仅对浅能级杂质起补偿作用，而且往往成为非平衡载流子的复合中心。Au 在 Si、Ge 中的多重能级状况，就是一个深能级杂质作用的典型例子。

(6) 半导体中的缺陷和位错，也在禁带中引入能级，既可以是施主又可以是受主，多为深能级。

## 2.2 概念思考与练习题

**【2-1】** 说明类氢杂质能级以及电离能的物理意义。为什么浅受主、施主能级分别位于价带之上或导带之下，而且电离能的数值较小？

**【2-2】** 说明在纯 Ge、Si 中掺入Ⅲ族或Ⅴ族元素后，对半导体导电性能有何重大影响。杂质半导体(p 型或 n 型)应用很广，但为什么我们很强调对半导体材料的提纯？

**【2-3】** 杂质能级为什么位于禁带之中？能带图上如何表示中性和电离杂质？杂质电离后在半导体中产生些什么？

**【2-4】** 把不同种类的施主杂质掺入同一种半导体材料中，杂质的电离能和轨道半径是否不同？把同一种杂质掺入到不同的半导体材料中(如 Ge 或 Si)，杂质的电离能和轨道半径又是否都相同？

**【2-5】** 何谓深能级杂质？它们的电离有什么特点？

**【2-6】** 为什么金元素在 Ge 或 Si 中电离后可以引入多个施主或受主能级？

**【2-7】** 现有两块的硅单晶，其中一块是高纯度的本征硅，另一块是含有深、浅施主和受主能级完全补偿的半导体。举出两种能识别它们的实验方法，并说明实验原理。

**【2-8】** 说明杂质补偿在制作半导体器件中的重大作用。

**【2-9】** 说明半导体中浅能级杂质和深能级杂质的主要特点和作用各是什么？

**【2-10】** 完美晶体和含适量杂质或缺陷的实际晶体之间在能带结构上的主要区别是什么？为什么Ⅱ族元素一般在硅中产生深能级，而在砷化镓中产生浅能级？

**【2-11】** 分析化合物半导体 PbS 中 S 的间隙原子和缺陷在理论上各形成施主还是受主？根据你的回答，说明半导体材料自补偿效应的物理意义。

**【2-12】** 为了控制某些化合物半导体的导电类型，除了掺杂还有什么方法可以利用？试以由本征硫化铅晶体制备 p 型硫化铅晶体为例说明之。

**【2-13】** 什么是等电子杂质(或称等价杂质)？等电子杂质对本底材料能带结构的影

响主要有哪两种？试以 GaAs 中的等电子杂质为例说明之。

## 2.3 典型例题解析

**【例 2-1】** 玻尔原子的允许轨道半径和能级由下式给出

$$r_n = \frac{\varepsilon_0 h^2 n^2}{\pi m_0 Z q^2}, \quad E_n = -\frac{m_0 q^4 Z^2}{8\varepsilon_0^2 h^2 n^2}$$

式中，$Z$ 是原子序数；$q$ 和 $m_0$ 分别是电子的电量和质量；$h$ 是普朗克常数；$n=1,2,3,\cdots$为主量子数；$\varepsilon_0$ 是真空中的介电常数。

证明以上方程可以写成

$$r_n = 0.529\frac{n^2}{Z}\ (\text{Å})$$

$$E_n = -13.6\frac{Z^2}{n^2}\ (\text{eV})$$

**解：** 代入有关常数后

$$r_n = \frac{8.854\times10^{-14}\times10^{10}\times(6.624\times10^{-34})^2 n^2}{3.14\times9.1\times10^{31}\times(1.6\times10^{19})^2 Z}$$

$$= 0.529\frac{n^2}{Z}\ (\text{Å})$$

$$E_n = \frac{9.1\times10^{-31}\times(1.60\times10^{-19})^4 Z^4}{8\times(8.854\times10^{-12})^2\times(6.6\times10^{-34})^2 n^2}$$

$$= \frac{21.8\times10^{\ 19} Z^2}{n^2}\ (\text{J})$$

所以

$$E_n = -\frac{21.8\times10^{-19}\times6.25\times10^{18} Z^2}{n^2}$$

$$= -13.6\frac{Z^2}{n^2}\ (\text{eV})$$

**【例 2-2】** 在半导体中，V 族杂质原子外层第五个电子的运动，可以看成是在围绕一个正的核电荷$+q$ 的圆形轨道上，并穿过具有体介电常数的材料。

试证明，如果介电常数为 11.7，则只需要有大约 0.1eV 能量的电子，就能在晶体中自由导电。求基态轨道的半径，从而说明电子是在体介质中运动的假设。材料的晶格常数为 5.42Å。

**解：** 氢原子基态的能量为 $Z=1$，$n=1$ 时 $E_n$ 的值

$$E_n = -13.6\frac{Z^2}{\varepsilon^2 n^2}\text{（考虑介电材料的影响）}$$

---

注：1Å=10nm

$$= -13.6\frac{1}{(11.7)^2} = 0.099\ (\text{eV})$$

显然，电子的能量只要大于 0.099eV，就能脱离核电荷的束缚，在晶体中运动。同理可得基态半径

$$r = 0.529\frac{\varepsilon n^2}{Z} = 0.529 \times 11.7 = 6.16(\text{Å}) = 0.616(\text{nm})$$

材料的晶格常数只有 0.542nm，而最小轨道略大于 0.542nm，说明电子是在最靠近相邻原子的外面运动，所以本质上还是在晶体中运动。

**【例 2-3】** 半导体硅单晶的介电常数 $\varepsilon_r = 11.8$，电子和空穴的有效质量各为 $m_{nl} = 0.97m_0$，$m_{nt} = 0.19m_0$ 和 $m_{pl} = 0.16m_0$，$m_{ph} = 0.53m_0$，利用类氢模型估计：(1) 施主和受主电离能；(2) 基态电子轨道半径 $r_1$；(3) 相邻杂质原子的电子轨道明显交叠时，施主和受主浓度各为何值？

**解：**(1) 利用下式求得 $m_n^*$ 和 $m_p^*$。

$$\frac{1}{m_n^*} = \frac{1}{3}\left(\frac{1}{m_{nl}} + \frac{1}{m_{nt}}\right) = \frac{1}{3m_0}\left(\frac{1}{0.98} + \frac{2}{0.19}\right) = \frac{3.849}{m_0}$$

$$\frac{1}{m_p^*} = \frac{1}{3}\left(\frac{1}{m_{pl}} + \frac{1}{m_{ph}}\right) = \frac{1}{3m_0}\left(\frac{1}{0.16} + \frac{2}{0.53}\right) = \frac{10}{3m_0}$$

因此，施主和受主杂质电离能各为

$$\Delta E_D = \frac{m_n^*}{m_0}\frac{E_0}{\varepsilon_r^2} = \frac{1}{3.849} \times \frac{13.6}{11.8^2} = 0.025\ (\text{eV})$$

$$\Delta E_A = \frac{m_p^*}{m_0}\frac{E_0}{\varepsilon_r^2} = \frac{3}{10} \times \frac{13.6}{11.8^2} = 0.029\ (\text{eV})$$

(2) 基态轨道半径各为

$$\begin{aligned} r_{1,p} &= \varepsilon_r m_c r_{B1}/m_p^* = 11.8 \times 10 \times 0.53/3 \\ &= 20.84\ (\text{Å}) = 2.08 \times 10^{-9}(\text{m}) \\ r_{1,n} &= \varepsilon_r m_c r_{B1}/m_n^* = 11.8 \times 3.849 \times 0.53 \\ &= 24.07\ (\text{Å}) = 2.41 \times 10^{-9}\ (\text{m}) \end{aligned}$$

式中，$r_{B1}$是玻尔半径。

(3) 设每个施主杂质作用范围为$\frac{4}{3}\pi r_{1,n}^3$，即相当于施主杂质浓度为

$$\begin{aligned} N_D &= \frac{3}{4\pi r_{1,n}^3} = \frac{3}{4\pi \times (2.41 \times 10^{-9})^3} = 1.7 \times 10^{25}\ (1/\text{m}^3) \\ &= 1.7 \times 10^{19}(1/\text{cm}^3) \end{aligned}$$

同理

$$\begin{aligned} N_A &= \frac{3}{4\pi r_{1,p}^3} = \frac{3}{4\pi \times (2.08 \times 10^{-9})^3} = 2.65 \times 10^{25}\ (1/\text{m}^3) \\ &= 2.65 \times 10^{19}(1/\text{cm}^3) \end{aligned}$$

当施主和受主杂质浓度分别超过以上两值时，相邻杂质原子的电子轨道(波函数)将明显

地交叠。杂质电子有可能在杂质原子之间做共有化运动，造成杂质带导电。

**【例 2-4】** 试解释重掺杂半导体使禁带宽度变窄的原因。

**解答：**在重掺杂半导体中，杂质浓度对能带结构的作用表现在对两个能态密度函数的影响上。一个是与宿主晶格相联系的态密度，另一个是与杂质原子相联系的态密度。

对于 n 型硅，随着杂质浓度的增加，杂质向晶格提供的电子数越来越多，这些过量电子的屏蔽作用改变了宿主原子最外层电子所处的周期势场，而杂质原子本身在宿主晶格中分布的涨落性进一步使这一周期势场发生变化，这就导致了能带结构的改变——导带失去了原有的明确的边界，其边缘伸到了禁带，形成了所谓"能带尾"。这是对第一个能态密度的影响造成的。

对第二个能态密度的影响：随着杂质浓度的提高，杂质原子间的距离不断缩小，相邻杂质原子外层电子的波函数相互交叠，所对应的能态密度也随之变化，孤立的杂质能级扩展为准连续的杂质能带。

这样，在重掺杂半导体中，由于以上能带结构的变化，形成了简并能带，便导致了禁带宽度的变窄。定量计算表明，掺磷的硅材料，当磷浓度为 $3\times10^{18}\mathrm{cm}^{-3}$时。杂质带与导带已相当程度的重叠，当杂质浓度从 $10^{19}\mathrm{cm}^{-3}$增加到 $3\times10^{20}\mathrm{cm}^{-3}$时，杂质带与导带重叠很多，以至难以分辨。

**【例 2-5】** 试述硅晶体经过辐照后所产生的影响。

**解答：**入射粒子与硅晶体发生碰撞后，将形成空位一间隙原子对。这些空位一间隙原子对在室温下是稳定的，常称弗伦克尔缺陷。缺陷的产生主要决定于入射粒子的类型及其能谱，硅材料点阵特性(包括位错、微量杂质等)，辐射时的温度。例如：电子和质子在半导体中经受到卢瑟福散射，将给硅晶格点阵原子一个比较小的平均能量。辐射损伤的第一阶段产生均匀分布的弗伦克尔缺陷，其后空位形成复合中心。在硅中的空位和氧原子相互作用时产生 $A$ 中心，它处于导带下 0.18eV；硅中空位也可以和磷、砷等原子相互作用，产生 $E$ 中心。上述两者均是较有效的复合中心。空位可以成对地出现，形成双空位，其结果在价带以上 0.30eV 处产生一个复合能级。又如，中子在半导体中经过硬球散射，给硅原子一个比较大的平均能量，致使其和邻近原子继续碰撞，直到所有有关原子的能量减少到低于位移值为止。高能点阵原子的平均自由程是小的，所以这些能量被积累在晶格的小体积中。它通常涉及几百个原子，因此缺陷云集成堆，成为缺陷群。群心包含大量空位。实践表明，缺陷群起复合中心的作用。

当质子、电子、X 射线、$\gamma$ 射线穿进硅晶体，并和硅中的电子相互作用，这些辐射粒子把能量传给电子，如果电子所获得的能量大于它的结合能时，电子就离开原来的运动轨道，成为自由电子，而原子变成带电离子，这一过程就称为电离辐射效应。电离辐射效应的实质是产生了电子一空穴对，有时甚至还产生二次电子或三次电子，它将使硅材料的电导率升高。电离能量可以起催化剂的作用，将改变材料的分子结构，引起材料的化学变化。

**【例 2-6】** 当高能粒子辐射金属一氧化硅一硅时,为什么在氧化物中会积累正电荷?

**解答:** 当高能粒子穿过金属进入氧化硅时,与原子发生碰撞,使之电离,并在氧化硅中产生电子一空穴对。若金属相对于衬底为正向偏压,在电场作用下,电子向金属一氧化硅界面运动,而空穴向氧化硅一硅界面运动。在运动过程中,由于电子的寿命与迁移率之积较大,除一部分与空穴复合外,大部分离开氧化硅层,被金属所收集。空穴由于其寿命与迁移率之积较小,在运动过程中不是与电子重新复合,就是被氧化硅层中的空穴陷阱所俘获。由于氧化硅一硅界面势垒很高,硅不能向氧化硅提供电子。这样就在氧化硅一硅界面积累起正的空间电荷层。

# 第 3 章　半导体中载流子的统计分布

**主题词**

状态密度，状态密度有效质量，费米分布和玻尔兹曼分布，费米能级，导带和价带有效状态密度，电中性条件和电中性方程，本征半导体和杂质半导体的载流子浓度，非简并半导体和简并半导体，简并化条件。

## 3.1　理论概要与重点分析

(1) 载流子浓度是决定半导体导电性能的首要因素。在热平衡态下，半导体导带中的电子和价带中空穴浓度保持一个稳定的统计平均值，很显然这个数值与温度和杂质浓度密切相关。本章的主要任务是求出在各种条件下半导体中的载流子浓度及它与温度及杂质浓度的关系。它包括本征半导体，非简并和简并情况下的杂质半导体。

(2) 要解决载流子浓度问题，首先必须了解允许的量子态在能带中按能量如何分布，即状态密度。它表示能带中能量为 $E$ 处单位能量间隔内的量子态数，它是能量 $E$ 的函数。定义

$$g(E)=\frac{\mathrm{d}z}{\mathrm{d}E} \tag{3.1}$$

对于 Si、Ge 和 GaAs 等旋转椭球或球形等能面的导带

$$g_c(E)=\frac{V}{2\pi^2}\frac{(2m_{dn}^*)}{\hbar^3}(E-E_c)^{\frac{1}{2}} \tag{3.2}$$

式中，$m_{dn}^*=S^{\frac{2}{3}}(m_t^2m_l)^{\frac{1}{3}}$ 为电子状态密度有效质量，$S$ 为导带极值的个数。

多数半导体价带极大值附近可近似用球形等能面处理，而且轻、重空穴带在 $\boldsymbol{k}=0$ 处重合，其状态密度为

$$g_v(E)=\frac{V}{2\pi^2}\frac{(2m_{dp}^*)^{\frac{3}{2}}}{\hbar^3}(E_v-E)^{\frac{1}{2}} \tag{3.3}$$

式中，$m_{dp}^*=[(m_p)_l^{\frac{3}{2}}+(m_p)_h^{\frac{3}{2}}]^{\frac{2}{3}}$ 为空穴状态密度有效质量。

第二个必须了解的问题是电子如何按能量分布在能带中的各能级上。晶体能带中电子的能量状态是量子化的，电子在各能级上的分布遵从费米分布，一个电子占据能量为 $E$ 能级的概率，即费米分布函数

$$f(E)=\frac{1}{1+\exp\left(\dfrac{E-E_F}{k_0T}\right)} \tag{3.4}$$

式中的 $E_F$ 称为费米能级，它是电子热力学系统的化学势，是反映电子基本占据或基本不占据某一能量状态的一个界线标志，与温度、半导体类型及杂质浓度等有关。热平衡状态下，一个电子系统有相同的化学势，即有统一的费米能级。

在式(3.4)中，当 $E-E_F \gg k_0T$ 时，由于电子占据这些能级的几率很小，其费米分布过渡到玻尔兹曼分布

$$f(E) \approx f_B(E) = \exp\left(-\frac{E-E_F}{k_0T}\right) = A\exp\left(-\frac{E}{k_0T}\right) \tag{3.5}$$

能量为 $E$ 的量子态不被电子占据即被空穴占据的概率为

$$1-f(E) = \frac{1}{1+\exp\left(\frac{E_F-E}{k_0T}\right)} \tag{3.6}$$

当 $(E_F-E) \gg k_0T$ 时

$$1-f(E) = \exp\left(-\frac{E_F-E}{k_0T}\right) = B\exp\left(\frac{E}{k_0T}\right) \tag{3.7}$$

此时过渡到空穴的玻尔兹曼分布。

在非简并半导体中，$E_F$ 总是位于禁带中，$(E-E_F) \gg k_0T$ 或 $(E_F-E) \gg k_0T$ 总是成立的，因此对非简并半导体载流子浓度均可用式(3.5)或式(3.7)的玻尔兹曼分布来计算。

(3) 半导体导带中的电子浓度

$$n_0 = \frac{1}{V}\int_{\text{导带底}}^{\text{导带顶}} g_c(E)f(E)\mathrm{d}E \tag{3.8}$$

价带中空穴浓度

$$p_0 = \frac{1}{V}\int_{\text{价带底}}^{\text{价带顶}} g_v(E)[1-f(E)]\mathrm{d}E \tag{3.9}$$

对非简并半导体，$f(E)=f_B(E)$，通过一定的计算和简化

$$n_0 = N_c\exp\left(-\frac{E_c-E_F}{k_0T}\right) \tag{3.10}$$

$$p_0 = N_v\exp\left(-\frac{E_F-E_v}{k_0T}\right) \tag{3.11}$$

对简并半导体，$f(E)$ 用费米分布函数，代入式(3.8)、式(3.9)得

$$n_0 = N_c\frac{2}{\sqrt{\pi}}F_{\frac{1}{2}}\left(\frac{E_F-E_c}{k_0T}\right) \tag{3.12}$$

$$p_0 = N_v\frac{2}{\sqrt{\pi}}F_{\frac{1}{2}}\left(\frac{E_v-E_F}{k_0T}\right) \tag{3.13}$$

式中，$F_{\frac{1}{2}}\left(\frac{E_F-E_c}{k_0T}\right)$，$F_{\frac{1}{2}}\left(\frac{E_v-E_F}{k_0T}\right)$ 为费米积分，其值通过查费米积分表或图决定；$N_c=\frac{2(2\pi m_{dn}^*k_0T)^{\frac{3}{2}}}{h^3}$，$N_v=\frac{2(2\pi m_{dp}^*k_0T)^{\frac{3}{2}}}{h^3}$ 分别为导带和价带的有效状态密度。

(4) 以上两组式(3.10)，式(3.11)和式(3.12)，式(3.13)便是载流子浓度的基本公

式。为了求出在某温度和杂质浓度下载流子浓度的具体表达式，通常采用如下过程：写出电中性条件，列出电中性方程，解出 $E_F$，然后将 $E_F$，代入基本公式求出其载流子浓度。

要列出杂质半导体中的电中性方程，还必须引入杂质电离情况有关量：

施主能级上的电子浓度 $n_D = \dfrac{N_D}{1+\dfrac{1}{2}\exp\left(\dfrac{E_D-E_F}{k_0T}\right)}$ 中性 (3.14)

受主能级上的空穴浓度 $p_A = \dfrac{N_A}{1+\dfrac{1}{2}\exp\left(\dfrac{E_F-E_A}{k_0T}\right)}$ 中性 (3.15)

电离施主浓度 $n_D^+ = \dfrac{N_D}{1+2\exp\left(-\dfrac{E_D-E_F}{k_0T}\right)}$ 带正电 (3.16)

电离受主浓度 $p_A^- = \dfrac{N_D}{1+2\exp\left(-\dfrac{E_F-E_A}{k_0T}\right)}$ 带负电 (3.17)

平衡均匀半导体各处总是电中性的，即总的正电荷和负电荷必须相等，其电中性条件一般可写为

$$p_0+\sum_j n_{Dj}^+ = n_0+\sum_i p_{Ai}^- \tag{3.18}$$

(5) 非简并半导体在各种情况下的 $E_F$、$n_0$、$p_0$ 的计算公式如下。

① 本征半导体

电中性条件 $$n_0 = p_0 \tag{3.19}$$

电中性方程 $$N_c\exp\left(-\frac{E_c-E_F}{k_0T}\right)=N_v\exp\left(-\frac{E_F-E_v}{k_0T}\right) \tag{3.20}$$

费米能级 $$E_F=\frac{E_c+E_v}{2}+\frac{k_0T}{2}\ln\frac{N_v}{N_c} \tag{3.21}$$

载流子浓度 $$n_i=n_0=p_0=(N_cN_v)^{\frac{1}{2}}\exp\left(-\frac{E_g}{2k_0T}\right) \tag{3.22}$$

如将式(3.10)和式(3.11)相乘，再与式(3.22)比较可见，对于热平衡态下的非简并半导体

$$n_0p_0=n_i^2 \tag{3.23}$$

总是成立。

② 杂质半导体

杂质半导体分为只含一种施主杂质的 n 型半导体、只含一种受主杂质的 p 型半导体和含有一种施主和一种受主杂质的半导体。

对于只含一种施主杂质的 n 型半导体有：

电中性条件 $$n_0=p_0+n_0^+ \tag{3.24}$$

电中性方程

$$N_c\exp\left(-\frac{E_c-E_F}{k_0T}\right)=N_v\exp\left(-\frac{E_F-E_v}{k_0T}\right)+\frac{N_D}{1+2\exp\left(-\frac{E_D-E_F}{k_0T}\right)} \tag{3.25}$$

原则上,可通过式(3.25)解出任何温度下的 $E_F$ 值,但因得不出解析解,我们把它分成两个温度范围加以处理 。

一是在杂质电离起作用的温度范围内,式(3.24)中的 $p_0$ 可忽略,即有

$$N_c\exp\left(-\frac{E_c-E_F}{k_0T}\right)=\frac{N_D}{1+2\exp\left(-\frac{E_D-E_F}{k_0T}\right)} \tag{3.26}$$

解出

$$E_F=E_D+k_0T\ln\left[\frac{\left(1+\frac{8N_D}{N_c}\exp\frac{\Delta E_D}{k_0T}\right)^{\frac{1}{2}}-1}{4}\right] \tag{3.27}$$

$$n_0=n_D^+=\frac{2N_D}{1+\left[1+\frac{8N_D}{N_c}\exp\frac{\Delta E_D}{k_0T}\right]^{\frac{1}{2}}} \tag{3.28}$$

二是在本征激发起作用的温度范围内,式(3.24)中的 $n_D^+=N_D$

$$E_F=E_i+k_0T\ln\left[\frac{N_D+\sqrt{N_D^2+4n_i^2}}{2n_i}\right] \tag{3.29}$$

$$n_0=\frac{N_D+\sqrt{N_D^2+4n_i^2}}{2},\qquad p_0=\frac{n_i^2}{n_0} \tag{3.30}$$

为计算方便,我们把这两个温度范围再过渡到更细的 5 个温度区域,列于表 3.1 中。

**表 3.1 一种施主杂质的 n 型半导体,费米能级及载流子浓度各温度区域公式**

| 温度区域 | $E_F$ | $n_0, p_0$ |
|---|---|---|
| A 低温弱电离 | $\frac{1}{2}(E_c+E_D)+\frac{k_0T}{2}\ln\frac{N_D}{2N_c}$ | $n_0=\left(\frac{N_cN_D}{2}\right)^{\frac{1}{2}}\exp\left(-\frac{\Delta E_D}{2k_0T}\right)$ |
| A 中间电离 | $E_D+k_0T\ln\left[\frac{\left(1+\frac{8N_D}{N_c}\exp\frac{\Delta E_D}{k_0T}\right)^{\frac{1}{2}}-1}{4}\right]$ | $n_0=\frac{2N_D}{1+\left[1+\frac{8N_D}{N_c}\exp\frac{\Delta E_D}{k_0T}\right]^{\frac{1}{2}}}$ |
| B 饱和电离 | $E_c+k_0T\ln\frac{N_D}{N_c}$ | $n_0=N_D, p_0=\frac{n_i^2}{n_0}$ |
| B 过渡区 | $E_i+k_0T\ln\left(\frac{N_D+\sqrt{N_D^2+4n_i^2}}{2n_i}\right)$ | $n_0=\frac{N_D+\sqrt{N_D^2+4n_i^2}}{2}, p_0=\frac{n_i^2}{n_0}$ |
| B 强本征 | $\frac{E_c+E_v}{2}+\frac{k_0T}{2}\ln\frac{N_v}{N_c}$ | $n_0=p_0=n_i$ |

$$\begin{array}{c}T\\ \downarrow\\ T\end{array}$$

对重要的半导体，在 $T=300\text{K}$ 附近，属饱和电离范围的杂质浓度范围：

Si　$(1.5\times10^{11}\sim3\times10^{17})/\text{cm}^3$

Ge　$(2.4\times10^{14}\sim4\times10^{17})/\text{cm}^3$

对于只含一种受主杂质的 p 型半导体，也有类似的结果(分析略)。

对于含一种施主和一种受主杂质(有补偿)的半导体，$N_D>N_A$ 为 n 型，$N_D<N_A$ 为 p 型，电中性条件为

$$p_0+n_D^+=n_0+p_A^- \tag{3.31}$$

代入相应的表达式，即得到电中性方程，但不可能得出 $E_F$ 的解析解，只能用数值计算和图解法。现在仅就 $N_D>N_A$ 的 n 型半导体，且在实际中容易出现的温度区域为例予以说明。

在饱和电离时，式(3.31)变为

$$N_D=n_0+N_A$$

即有

$$n_0=N_D-N_A,\qquad p_0=\frac{n_i^2}{n_0} \tag{3.32}$$

$$E_F=E_c+k_0T\ln\frac{N_D-N_A}{N_c} \tag{3.33}$$

在过渡区

$$\begin{cases}p_0+N_D=n_0+N_A\\ p_0=\dfrac{n_i^2}{n_0}\end{cases}$$

解出

$$n_0=\frac{(N_D-N_A)+\sqrt{(N_D-N_A)^2+4n_i^2}}{2} \tag{3.34}$$

$$E_F=E_i+k_0T\ln\frac{n_0}{n_i} \tag{3.35}$$

对 $N_A>N_D$ 的 p 型半导体，也有类似的结果。

(6) 简并半导体，当杂质浓度足够高，或温度足够低，费米能级会接近导带底甚至进入导带(n 型)或接近价带顶，甚至进入价带(p 型)，这时导带中已有相当多的电子，或价带中已有相当多的空穴，会出现载流子的简并化问题。因而用玻尔兹曼分布来近似描写已不合适，必须用费米分布函数进行计算，这时的半导体称为简并半导体。简并半导体的载流子浓度由式(3.12)和式(3.13)给出。

如何判断在室温条件下发生简并，即简并化条件。如果已知费米能级 $E_F$ 的位置，则用如下关系来判断：

$E_c-E_F\geqslant 2k_0T$　　非简并

$2k_0T\geqslant E_c-E_F\geqslant 0$　　弱简并

$E_c-E_F\leqslant 0$　　简并

以 $E_c-E_F=0$ 为发生简并的标准，可以推得：当 $N_D(N_A)$ 与 $N_c(N_v)$ 同量级或更大时，即发生简并。在室温下根据各种半导体 $N_c$、$N_v$ 的数值，再与 $N_D$、$N_A$ 进行比较即可

判断是否发生了简并，例如对 Si、Ge 来说 $N_D$ 或 $N_A$ 在 $10^{18}cm^{-3}$ 量级以上即可用简并情况处理。

发生简并时，杂质浓度高，杂质能级会发生相互交叠，分裂成能带，形成杂质带导电，并出现电离能减小和禁带变窄效应。

## 3.2 概念思考与练习题

**【3-1】** 半导体处于怎样的状态才能叫处于热平衡状态？其物理意义如何。

**【3-2】** 什么叫统计分布函数？费米分布和玻尔兹曼分布的函数形式有何区别？在怎样的条件下前者可以过渡为后者？在一般情况下，为什么半导体中载流子分布可以用玻尔兹曼分布处理？

**【3-3】** 说明费米能级 $E_F$ 的物理意义。根据 $E_F$ 位置，如何计算半导体中电子和空穴浓度？如何理解费米能级 $E_F$ 是掺杂类型和掺杂程度的标志？

**【3-4】** 在 $T\neq0$ 时，$f(E)$对费米能级 $E_F$ 取什么样的对称形式？

**【3-5】** 在载流子浓度计算中，经常应用 $E-E_F\gg k_0T$ 这个条件把电子从费米统计过渡到玻尔兹曼统计，试说明这种过渡的物理和实际意义。

**【3-6】** 写出一般情况下半导体的电中性方程。此方程在半导体中有何重要意义？在不同情况下，将其简化，并说明简化理由。

**【3-7】** 若 n 型 Si 中掺入受主杂质，$E_F$ 升高还是降低？若温度升高，当本征激发起作用时，$E_F$ 在什么位置？为什么？

**【3-8】** 如何理解分布函数与状态密度的乘积再对能量积分即可求得电子浓度？

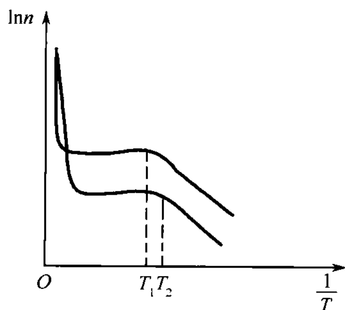



图 3-1 题 3-9 用图

**【3-9】** 不同掺杂浓度(同一杂质)的 n 型半导体其电子浓度和温度的关系曲线如图 3-1 所示。在左方曲线彼此重合，在右方超过某一温度 $T$ 后两条曲线平行，试说明其理由。这两部分曲线的斜率表示什么？

**【3-10】** 为什么硅半导体器件比锗器件的工作温度高？为什么说高温下半导体器件无法工作？

**【3-11】** 说明载流子浓度乘积方程：$n_0p_0=n_i^2$ 的物理意义。在什么条件下该式成立？为什么杂质含量越高，多子浓度越大，而少子浓度越小？当半导体中掺入的杂质类型和含量改变时，乘积 $n_0p_0$ 是否改变？当温度改变时，情况又如何？

**【3-12】** 对只含施主杂质的 n 型半导体，在室温时能否认为载流子浓度为 $n_0=N_D+n_i$，$p_0=n_i$？为什么？

**【3-13】** 欲使施主能级或受主能级恰好电离 1/3，各需满足什么条件？

**【3-14】** 有 n 型半导体，如果(1)不掺入受主；(2)掺入少量受主($N_A\ll N_D$)，那么当温度趋于 0K 时，两种情况下的费米能级的极限位置是否重合？

【3-15】 当温度一定时，杂质半导体的费米能级主要由什么因素决定？试把强 n、弱 n 型半导体与强 p、弱 p 型半导体的费米能级与本征半导体的费米能级进行比较。

【3-16】 对同一半导体，掺入三种不同浓度的施主杂质后，得到的 $E_F \sim T$ 关系曲线，如图 3-2 所示。试问曲线 1,2,3 中哪条对应较高的施主浓度，哪条对应较低的施主浓度？为什么？

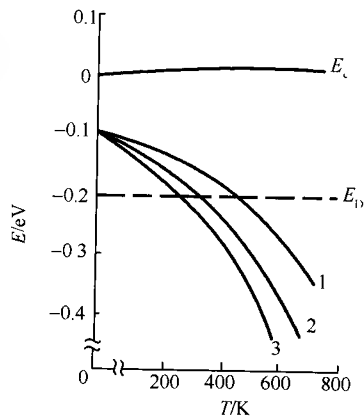



图 3-2 题 3-16 用图

【3-17】 什么叫载流子的简并化？试说明其产生的原因。有一重掺杂半导体，当温度升高到某一值时，导带中电子开始进入简并，当温度继续升高时简并能否解除？

【3-18】 某含有一些施主的 p 型半导体在极低温度下(即 $T \to 0$ 时)电子在各种能级上的分布情况如何？定性说明随温度升高分布将如何改变。

【3-19】 有 4 块含有不同施主浓度的 Ge 样品。在室温下分别为：

(1)高电导 n-Ge；(2)低电导 n-Ge；(3)高电导 p-Ge；(4)低电导 p-Ge。比较 4 块样品 $E_F$ 的高低。分别说明它们达到全部杂质电离与本征导电温度的高低。

【3-20】 有一块只含有 1 种受主杂质和 1 种施主杂质的 p 型硅单晶，用什么实验方法可以测定它的杂质补偿度(即$\frac{N_D}{N_A} \times 100\%$)？说明实验方法的原理。

【3-21】 室温下某 n 型 Si 单晶掺入的施主浓度 $N_D$ 大于另一块 n 型 Ge 掺入的施主浓度 $N_{D1}$，试问哪一块材料的平衡少子浓度较大？为什么？

【3-22】 如果向半导体中重掺施主杂质，就你所知会出现一些什么效应？

【3-23】 比较并区别下面的物理概念：

(1) $\boldsymbol{k}$ 空间状态密度、能量状态密度和能带的有效状态密度。

(2) 简并半导体和非简并导体。

【3-24】 对 Si 在下面的掺杂条件下，定性讨论费米能级随温度的变化：

(1) 含有 $10^{16}\text{cm}^{-3}$ 的硼；

(2) 含有 $10^{16}\text{cm}^{-3}$ 的硼和 $9\times10^{15}\text{cm}^{-3}$ 的金；

(3) 含有 $10^{15}\text{cm}^{-3}$ 的硼和 $9\times10^{15}\text{cm}^{-3}$ 的金。

【3-25】 金在硅中分别引入一个在导带 $E_c$ 下面 0.54eV 的受主能级，在价带顶 $E_v$ 上面 0.35eV 处的施主能级，在下列情况下的 Si 中，金能级将是什么样的电荷状态？

(1) 高施主杂质浓度；

(2) 高受主杂质浓度(均相对金浓度而言的)。

根据上面讨论结果，确定晶体是 n 型还是 p 型。

【3-26】 一块 n 型硅样品，在 500K 时，其中电子浓度为 $2\times10^{16}\text{cm}^{-3}$，空穴浓度为 $2\times10^{14}\text{cm}^{-3}$，问该半导体是否处于热平衡状态？(已知 500K 时，$n_i = 4\times10^{14}\text{cm}^{-3}$)

**【3-27】** 说明两种测定施主和受主杂质浓度的实验方法及原理。

**【3-28】** 指出图 3-3 中各表示的是什么半导体?

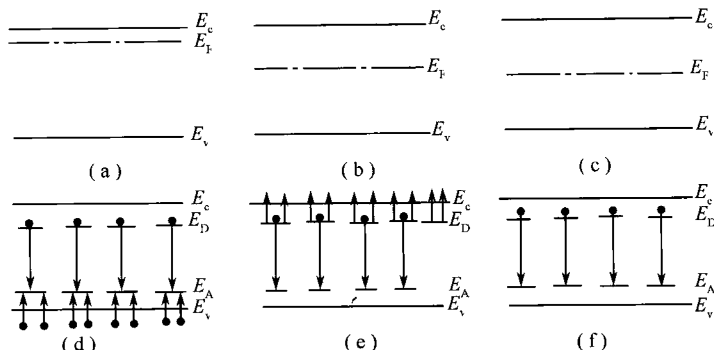



图 3-3　题 3-28 用图

**【3-29】** 当 $T \to 0$ 时,n 型半导体的导带中电子浓度为"$n_{无}$",若在该半导体中掺入少量的受主杂质,其浓度为 $N_A$ 时,导带中电子浓度为"$n_{有}$",试证明:

$$\frac{n_{有}}{n_{无}} = \left(\frac{n_{有}}{N_A}\right)^{\frac{1}{2}}$$

**【3-30】** 如图 3-4 所示,解释 $n_0 \sim T$ 关系曲线。

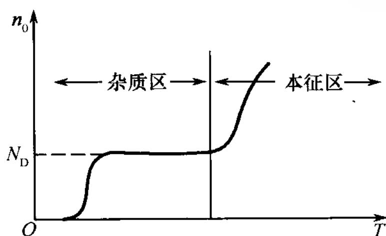



图 3-4　题 3-30 用图

**【3-31】** 证明:有轻空穴和重空穴参与导电的 p 型材料,其空穴的状态密度有效质量可写成

$$m_{dp} = [(m_p)_l^{\frac{3}{2}} + (m_p)_h^{\frac{3}{2}}]^{\frac{2}{3}}$$

式中:$(m_p)_l$ 为轻空穴的状态密度有效质量;$(m_p)_h$ 为重空穴的状态密度有效质量。

**【3-32】** 试从电子共有化运动,杂质电离能的降低形成带尾来讨论半导体中掺杂浓度的提高所产生的影响。

**【3-33】** 对一种禁带宽度为 $E_g$,300K 下导带及价带有效态密度分别为 $N_c$ 和 $N_v$,而施主浓度为 $N_D$ 的非简价半导体,证明由杂质导电状态到本征状态的转折温度:

$$T_d = E_g / k \ln\left[\frac{N_c N_v}{N_D^2}\left(\frac{T_d}{300}\right)^3\right]$$

# 3.3 典型例题解析

**【例 3-1】** 设二维正方格子的晶格常数为 $a$,若电子能量可表示为

$$E(k) = \frac{h^2(k_x^2 + k_y^2)}{2m_n^*}$$

试求状态密度。

**解:** 能量为 $E$ 的等能线方程式可以写成

$$k_x^2+k_y^2=\frac{2m_n^*E}{h^2}$$

显然，这是一个半径 $R=\left(\frac{2m_n^*E}{h^2}\right)^{\frac{1}{2}}$ 的圆，其面积为：$\pi R^2=\frac{2\pi m_n^*E}{h^2}$，用其面积乘以状态密度 $2S$（$S$ 为晶体的面积，且考虑自旋）就是圆内所包含的状态

$$Z(E)=\frac{4\pi S m_n^*E}{h^2}$$

$Z(E)$ 即表示能量在 $E$ 以下状态的数目，如果能量增加 $\mathrm{d}E$，则 $Z(E)$ 增加 $\mathrm{d}Z(E)$，$\mathrm{d}Z(E)$ 就是能量 $E$ 到 $E+\mathrm{d}E$ 之间的状态数。

对上式求微分即得

$$\mathrm{d}Z(E)=4\pi S\frac{m_n^*}{h^2}\mathrm{d}E$$

单位能量间隔内的状态数，即状态密度为

$$g(E)=\frac{\mathrm{d}Z(E)}{\mathrm{d}E}=4\pi S\frac{m_n^*}{h^2}$$

**【例 3-2】** 若费米能级 $E_F=5\mathrm{eV}$，利用费米函数计算在什么温度下电子占据 $E=5.5\mathrm{eV}$ 能级的概率为 1%。并计算在该温度下电子分布概率从 0.9～0.1 所对应的能量区间。

**解：** 由费米分布函数

$$f(E)=\frac{1}{1+\exp\left(\frac{E-E_F}{k_0T}\right)}$$

可得

$$T=\frac{E-E_F}{k_0\ln\left(\frac{1}{f(E)}-1\right)}$$

其中，$1\mathrm{eV}=1.602\times10^{-12}\mathrm{erg}$，$k_0=1.38\times10^{-16}\mathrm{erg/K}=8.63\times10^{-5}\ \mathrm{eV/K}$。代入有关数据得

$$T=\frac{5.5-5}{8.63\times10^{-5}\times\ln\left(\frac{1}{0.01}-1\right)}=1261\ (\mathrm{K})$$

由费米函数可得

$$E=E_F+k_0T\ln\left(\frac{1}{f(E)}-1\right)$$

当 $f=0.9$ 时

$$E_1=E_F+8.63\times10^{-5}\times1261\times\ln\left(\frac{1}{0.9}-1\right)$$
$$=E_F-0.24\ (\mathrm{eV})$$

当 $f=0.1$ 时

$$E_2=E_F+8.63\times10^{-5}\times1261\times\ln\left(\frac{1}{0.1}-1\right)$$

$$= E_F + 0.24(\text{eV})$$

能量区间为 $\Delta E = E_2 - E_1 = 0.48(\text{eV})$。

**【例 3-3】** 计算能量 $E=E_c$ 到 $E=E_c+100\left(\frac{h^2}{8m_n^* L^2}\right)$之间单位体积中的量子态数。

**解：** 导带底 $E_c$ 附近单位能量间隔量子态数

$$g_c(E) = 4\pi V \frac{(2m_{dn})^{3/2}}{h^3}(E-E_c)^{\frac{1}{2}}$$

$g_c$ 即状态密度。

在 $\mathrm{d}E$ 范围内单位体积中的量子态数

$$\frac{\mathrm{d}Z}{V} = g_c(E)\frac{1}{V}\mathrm{d}E$$

所以

$$Z = \frac{1}{V}\int_{E_1}^{E_2}\mathrm{d}Z = 4\pi\frac{(2m_n^*)^{3/2}}{h^3}\int_{E_c}^{E_c+100\left(\frac{h^2}{8m_n^* L^2}\right)}(E-E_c)^{\frac{1}{2}}\mathrm{d}E$$

$$= 4\pi\frac{(2m_n^*)^{3/2}}{h^3}\times\frac{2}{3}\times\left(100\frac{h^2}{8m_n^* L^2}\right)^{\frac{3}{2}} = 1000\pi/3L^3$$

求得 $Z=1000\pi/3L^3$。

**【例 3-4】** 试证明实际硅、锗中导带底附近状态密度公式为

$$g_c(E) = 4\pi V\frac{(2m_n^*)^{3/2}}{h^3}(E-E_c)^{\frac{1}{2}}$$

式中，$m_n^* = m_{dn} = S^{\frac{2}{3}}(m_t^2 m_l)^{\frac{1}{3}}$，$S$ 为导带底对称状态数。

**证明：** Si、Ge 在导带附近的等能面为沿主轴方向的旋转椭球面，设其极值仍为 $E_c$，则 $E(k)\sim k$ 关系为

$$E(k) = E_c + \frac{h^2}{2}\left(\frac{k_1^2+k_2^2}{m_t}+\frac{k_2^2}{m_l}\right)$$

与椭球的标准方程

$$\frac{k_1^2}{a^2}+\frac{k_2^2}{b^2}+\frac{k_3^2}{c^2} = 1$$

比较得

$$a = b = \left[\frac{2m_t(E-E_c)}{h^2}\right]^{1/2}$$

$$c = \left[\frac{2m_l(E-E_c)}{h^2}\right]^{1/2}$$

$a$、$b$、$c$ 即 $k$ 空间等能面为旋转椭球的三个半径。故椭球体积为

$$\Omega = \frac{4}{3}\pi abc = \frac{4\pi}{3h^3}(8m_l m_t^2)^{\frac{1}{2}}(E-E_c)^{\frac{3}{2}}$$

对应能量为 $E\rightarrow E+\mathrm{d}E$ 范围内两椭球壳层之间体积为

$$\mathrm{d}\Omega = \frac{\mathrm{d}\Omega}{\mathrm{d}E}\mathrm{d}E$$

即 $$\mathrm{d}\Omega = \frac{2\pi}{h^3}(8m_l m_t^2)^{\frac{1}{2}}(E-E_c)^{\frac{1}{2}}\mathrm{d}E$$

设晶体体积为 $V$，则其量子态密度为 $2V$(考虑自旋)，故在能量空间 $\mathrm{d}\Omega$ 体积内的量子态数为

$$\mathrm{d}Z = 2V\frac{2\pi}{h^3}(8m_l m_t^2)^{\frac{1}{2}}(E-E_c)^{\frac{1}{2}}\mathrm{d}E$$

因为导带极值在 $k$ 空间有 $S$ 个。所以状态密度为

$$g_c(E) = \frac{\mathrm{d}Z}{\mathrm{d}E} = 4\pi V\frac{S(8m_l m_t^2)^{1/2}}{h^3}(E-E_c)^{1/2}$$

令 $$S(8m_l m_t^2)^{1/2} = (2m_{dn})^{3/2}$$

则 $$m_{dn} = S^{2/3}(m_l m_t^2)^{1/3}$$

所以 $$g_c(E) = 4\pi V\frac{(2m_{dn})}{h^3}(E-E_c)^{1/2}$$

**【例 3-5】** 两块 n 型硅材料，在某一温度 $T$ 时，第一块与第二块的电子密度之比为 $n_1/n_2=\mathrm{e}$(e 是自然对数的底)。

(1) 如果第一块材料的费米能级在导带底之下 $3k_0T$，试求出第二块材料中费米能级的位置；

(2) 求出两块材料中空穴密度之比 $p_1/p_2$。

**解**：(1) 设第一块和第二块材料的费米能级分别为 $E_{F1}$ 和 $E_{F2}$，利用式(4.1)可得

$$\frac{n_1}{n_2} = \frac{\exp\left(-\frac{E_c-E_{F1}}{k_0T}\right)}{\exp\left(-\frac{E_c-E_{F2}}{k_0T}\right)} = \mathrm{e}$$

显然 $$\frac{E_{F1}-E_{F2}}{k_0T} = 1$$

已知 $E_{F1}=E_c-3k_0T$，所以 $E_{F2}=E_c-4k_0T$，即第二块材料的费米能级在导带底之下 $4k_0T$。

(2) $n_1p_1=n_2p_2=n_i^2$

所以 $$\frac{p_1}{p_2} = \frac{n_2}{n_1} = \frac{1}{\mathrm{e}}$$

**【例 3-6】** 硼的密度分别为 $N_{A1}$ 和 $N_{A2}$($N_{A1}>N_{A2}$)的两个硅样品，在室温条件下：

(1) 哪个样品的少子密度低？

(2) 哪个样品的 $E_F$ 离价带顶近？

(3) 如果再掺入少量的磷(磷的密度 $N_D'<N_{A2}$)，它们的 $E_F$ 如何变化？

**解**：为了使问题简单明确(当然也是实际工作中常遇到的情况)，我们假定 $N_{A1}$ 和 $N_{A2}$ 都远大于室温下的本征载流子密度，即讨论杂质饱和电离的情况。

(1) 掺硼的硅是 p 型样品。在饱和电离时，少子密度 $n_0=n_i^2/N_A$。因为 $N_{A1}>N_{A2}$，所以 $n_{02}>n_{01}$，即硼的密度为 $N_{A1}$ 的样品少子密度低。

(2) 在饱和电离情况下

$$N_A = p_0 = N_v \exp\left(-\frac{E_F - E_v}{k_0 T}\right)$$

所以

$$E_F - E_v = k_0 T \ln\left(\frac{N_v}{N_A}\right)$$

显然，$(E_F - E_v)_1 < (E_F - E_v)_2$，即密度为 $N_{A1}$ 的样品的 $E_F$ 离价带顶近。

(3) 假设 $N_{A2} - N'_D \gg n_i$，即有反型杂质补偿的情况下，样品仍然处于饱和电离区。由于在两个样品中有效的受主密度都减小了，所以它们的 $E_F$ 与价带顶的距离都变大了，不过仍然是密度为 $N_{A1}$ 的样品的 $E_F$ 离价带顶近。

**【例 3-7】** 一块有杂质补偿的硅材料，已知掺入受主密度 $N_A = 1 \times 10^{15}/\text{cm}^3$，室温下测得其 $E_F$ 恰好与施主能级重合，并得知平衡电子密度为 $n_0 = 5 \times 10^{15}/\text{cm}^3$。已知室温下硅的本征载流子密度 $n_i = 1.5 \times 10^{10}/\text{cm}^3$，试求：

(1) 平衡少子密度是多少？

(2) 掺入材料中的施主杂质密度是多少？

(3) 电离杂质和中性杂质的密度各是多少？

**解：**(1) 平衡少子密度

$$p_0 = \frac{n_i^2}{n_0} = \frac{(1.5 \times 10^{10})^2}{5 \times 10^{15}} = 4.5 \times 10^4 (1/\text{cm}^3)$$

(2) 在杂质电离区，有补偿的 n 型材料的电中性条件可以写成

$$n_0 + N_A = N_D - n_d = \frac{N_D}{1 + 2\exp\left(\frac{E_F - E_D}{k_0 T}\right)}$$

在上式中代入 $E_F = E_D$，则有

$$n_0 + N_A = \frac{N_D}{3}$$

即施主密度 $N_D = 3(n_0 + N_A) = 1.8 \times 10^{16}\,\text{cm}^{-3}$。

(3) 电离杂质包括全部电离的受主和部分电离的施主，其总的密度为 $N_A + n_0 = 6 \times 10^{15}\text{cm}^{-3}$，中性杂质密度为 $N_D - n_0 - N_A = 1.2 \times 10^{16}\text{cm}^{-3}$。

**【例 3-8】** 对于掺 n 型杂质磷的硅、锗材料，试计算其在室温下发生弱简并时的掺磷浓度。

**解：**考虑掺 n 型杂质时的情况，简并时电中性条件为 $n_D^+ = n$，所以

$$N_c \frac{2}{\sqrt{\pi}} F_{1/2} \frac{E_F - E_c}{k_0 T} = \frac{N_D}{1 + 2\exp\left(\frac{E_F - E_D}{k_0 T}\right)}$$

$$N_D = \frac{2N_c}{\sqrt{\pi}}\left[1 + 2\exp\left(\frac{E_F - E_c}{k_0 T}\right) \cdot \exp\left(\frac{\Delta E_D}{k_0 T}\right)\right] F_{1/2}\left[\frac{(E_F - E_c)}{k_0 T}\right]$$

开始发生弱简并时，$E_c - E_F = 2k_0 T$，故

$$N_D = \frac{2N_c}{\sqrt{\pi}}\left(1+2\exp^{-2}\cdot\exp\frac{\Delta E_D}{k_0T}\right)F_{1/2}(-2)$$

由教材图 3-16 知 $F_{1/2}(-2)=0.1$。

(1) 对于硅材料，室温下 $N_c=2.8\times10^{19}\text{cm}^{-3}$，磷杂质在硅中的电离能 $\Delta E_D=0.044\text{eV}$。

$$N_D=\frac{2\times2.8\times10^{19}}{\sqrt{\pi}}[1+2\exp(-2)\exp(0.044/0.026)]\times0.1$$

$$=7.8\times10^{18}(1/\text{cm}^3)$$

(2) 对于锗材料，室温下 $N_c=1.04\times10^{19}\text{cm}^{-3}$，磷杂质在锗中电离能 $\Delta E_D=0.012\text{eV}$，故

$$N_D=\frac{2\times1.04\times10^{19}}{\sqrt{\pi}}[1+2\exp(-2)\exp(0.012/0.026)]\times0.1$$

$$=1.68\times10^{18}(1/\text{cm}^3)$$

**【例 3-9】** 对于 p 型半导体，在杂质电离区，证明

$$\frac{p_0(p_0+N_D)}{N_A-N_D-p_0}=\frac{N_v}{g}\exp\left(-\frac{E_A-E_v}{k_0T}\right) \tag{1}$$

并分别求出 $p_0\ll N_A$ 和 $N_D\ll p_0\ll N_A$ 两种情况下，空穴密度 $p_0$ 和费米能级 $E_F$ 的值，说明它们的物理意义。式中 $g$ 是受主能级的自旋简并度($g=2$)。

**解：** 对于有补偿的 p 型半导体，实际上施主完全被补偿，只需考虑受主和价带交换空穴的过程。在非简并情况下，容易写出：

受主上空穴的损失率　　$H_1=k_1(N_A-N_D-p_0)$

受主上空穴的俘获率　　$H_2=k_2p_0(p_0+N_D)$

式中 $k_1,k_2$ 是只和温度有关的常数。

在热平衡情况下，$H_1=H_2$，即

$$\frac{p_0(p_0+N_D)}{N_A-N_D-p_0}=\frac{k_1(T)}{k_2(T)}=K(T) \tag{2}$$

式(2)就是质量作用定律。下面求出热平衡常数 $K(T)$。

用 $N_A^-$ 表示电离的受主密度($N_A^-=p_0+N_D$)，式(1)可以改写为

$$\frac{p_0N_A^-}{N_A-N_A^-}=\frac{p_0}{\dfrac{N_A}{N_A^-}-1}=K(T)$$

根据受主能级被电子占据的概率

$$\frac{N_A}{N_A^-}=g\exp\left(\frac{E_A-E_F}{k_0T}\right)+1$$

所以

$$K(T)=\frac{N_v\exp\left(-\dfrac{E_F-E_v}{k_0T}\right)}{g\exp\left(\dfrac{E_A-E_F}{k_0T}\right)}=\frac{N_v}{g}\exp\left(-\frac{E_A-E_v}{k_0T}\right)$$

把这个结果代入式(2)，即得出求证的式(1)。

(1) 当 $p_0 \ll N_D$ 时，式(1)简化为

$$\frac{p_0 N_D}{N_A - N_D} = \frac{N_v}{g}\exp\left(-\frac{E_A - E_v}{k_0 T}\right)$$

即

$$p_0 = \frac{N_A - N_D}{N_D} \cdot \frac{N_v}{g}\exp\left(-\frac{E_A - E_v}{k_0 T}\right)$$

把 $p_0 = N_v \exp\left(-\frac{E_F - E_v}{k_0 T}\right)$ 代入上式得

$$E_F = E_A - k_0 T \ln \frac{N_A - N_D}{g N_D}$$

这是在低温极限附近受主弱电离的情况，即受主除了接受来自施主的电子外，接受从价带激发来的电子是极少的。在这种情况下，费米能级位置和没有施主补偿的 p 型半导体是不同的。在 $T \to 0\text{K}$ 时，$E_F$ 的极限位置实际上与受主能级重合，随着温度的增加，$E_F$ 线性地下降。

(2) 当 $N_D \ll p_0 \ll N_A$ 时，式(1)简化为

$$\frac{p_0^2}{N_A} = \frac{N_v}{g}\exp\left(-\frac{E_A - E_v}{k_0 T}\right)$$

即

$$p_0 = \left(\frac{N_v N_A}{g}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{E_A - E_v}{2 k_0 T}\right)$$

而

$$E_F = \frac{1}{2}(E_v + E_A) - \frac{1}{2} k_0 T \ln\left(\frac{N_A}{g N_v}\right)$$

这是低温弱电离情况，而且补偿的施主又很少(极限情况 $N_A = 0$)。在这种条件下，施主杂质的影响是可以忽略的，和只有一种受主存在弱电离的情况完全相同。

**【例 3-10】** 有一 n 型半导体，除施主浓度 $N_D$ 外，还含有少量的受主，其浓度为 $N_A$，求弱电离情况电子浓度的表达式。

**解：** 当有受主存在时，从施主激发出来的电子，有一部分要填充受主能级 $E_A$，电中性条件为

$$N_A + n_0 = n_D^+ \tag{1}$$

式中 $n_D^+$ 为电离施主浓度为

$$n_D^+ = N_D[1 - f(E_D)] = \frac{N_D}{1 + 2\exp\left(\frac{E_F - E_D}{k_0 T}\right)} \tag{2}$$

$n_0$ 为导带中电子浓度为

$$n_0 = N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_F}{k_0 T}\right) \tag{3}$$

将式(2)、式(3)代入式(1)得

$$N_A + N_c\exp\left(-\frac{E_c - E_F}{k_0 T}\right) = \frac{N_D}{1 + 2\exp\left(\frac{E_F - E_D}{k_0 T}\right)}$$

在弱电离范围内，上式右端分母中的 1 可以忽略不计，则

$$N_A + N_c\exp\left(-\frac{E_c - E_F}{k_0 T}\right) = \frac{1}{2}N_D\exp\left(-\frac{E_F - E_D}{k_0 T}\right)$$

在极弱电离情况下，激发到导带的电子数远少于受主 $N_A$，故可忽略上式左端的第二项，这样，由上式求得费米能级

$$E_F = E_D + k_0 T\ln\frac{N_D}{2N_A} \tag{4}$$

式(4)代入式(3)即可得

$$n_0 = \frac{N_c N_D}{2N_A}\exp\left(-\frac{E_c - E_D}{k_0 T}\right)$$

式中，$E_c - E_D = \Delta E_D$ 为施主的电离能。

**【例 3-11】** 锌(Zn)在硅中有双重受主能级，即每一个 Zn 原子可以在较低的能级 $E_{A1}$ ($\Delta E_{A1} = E_{A1} - E_v = 0.31\text{eV}$)上接受一个电子，在较高的能级 $E_{A2}$ ($\Delta E_{A2} = E_{A2} - E_v = 0.55\text{eV}$)上接受 2 个电子。为补偿 $N_D = 10^{16}/\text{cm}^3$ 的 n-Si 需掺杂 Zn 原子的浓度为多少？

**解：** 依据题意其电中性方程为

$$n_0 + p_{A1}^- + p_{A2}^- = p_0 + n_D^+ \tag{1}$$

完全补偿后，$n_0 = p_0$，室温下施主杂质全部电离，所以

$$n_D^+ = N_D$$

代入式(1)后即得

$$p_{A1}^- + 2p_{A2}^- = N_D \tag{2}$$

设掺入 Zn 原子浓度为 $N_A$，则

$$p_{A1}^- = \frac{N_A}{1 + 2\exp\left(\frac{E_F - E_{A1}}{k_0 T}\right)}, \quad p_{A2}^- = \frac{N_A}{1 + 2\exp\left(\frac{E_F - E_{A2}}{k_0 T}\right)}$$

上两式代入式(2)，且考虑完全补偿后 $E_F = \frac{1}{2}E_g = E_i = 0.56\text{eV}$ 得

$$\frac{N_A}{1 + 2\exp\left(-\frac{E_i - E_{A1}}{k_0 T}\right)} + \frac{2N_A}{1 + 2\exp\left(-\frac{E_i - E_{A2}}{k_0 T}\right)} = N_D \tag{3}$$

式中

$$E_i - E_{A1} = 0.56 - 0.31 = 0.25\ (\text{eV})$$
$$E_i - E_{A2} = 0.56 - 0.55 = 0.01\ (\text{eV})$$

代入式(3)得

$$0.9998N_A + 0.846N_A = N_D$$

所以

$$N_A = \frac{N_D}{0.9998 + 0.846} = \frac{10^{16}}{1.846} = 5.4 \times 10^{15}(1/\text{cm}^3)$$

**【例 3-12】** 某半导体硅样品，施主杂质原子的浓度为 $10^{12}\text{cm}^{-3}$，试问在什么温度下它就不再呈现本征导电性？设 $E_g = 1\text{eV}$，$m_n^* = m_p^* = 0.2m_0$

**解：** 本征载流子浓度

$$n_i = (N_c N_v)^{\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{E_g}{2k_0 T}\right)$$

式中，$N_c = \frac{2(2\pi m_{dn}^* k_0 T)^{\frac{3}{2}}}{h^3}$；$N_v = \frac{2(2\pi m_{dp}^* k_0 T)^{\frac{3}{2}}}{h^3}$，分别为导带和价带的有效状态密度。

若要保证硅样品为杂质导电，则施主杂质浓度必须等于或大于本征载流子浓度 $n_i$，即

$$N_d \geqslant (N_c N_v)^{\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{E_g}{2k_0 T}\right)$$

代入已知数据

$$\begin{aligned} m_n^* = m_p^* &= 0.2m_0 = 0.2 \times 9.1 \times 10^{-28} \\ &= 1.81 \times 10^{-28}(\text{g}) \\ E_g &= 1\text{eV} = 1.6 \times 10^{\ 12}\text{erg} \\ N_c = N_v &= \frac{2 \times (2 \times 3.14 \times 1.81 \times 10^{23} \times 1.38 \times 10^{-16})^{3/2}}{(6.62 \times 10^{\ 27})^3} T^{\frac{3}{2}} \\ &= 4.30 \times 10^{14} T^{\frac{3}{2}}(1/\text{cm}^3) \end{aligned}$$

所以

$$10^{12} \geqslant 4.30 \times 10^{14} \times T^{\frac{2}{3}} \exp \frac{1.6 \times 10^{-12}}{2 \times 1.38 \times 10^{-16} \times T}$$

$$10^{12} \geqslant 4.30 \times 10^{14} \times T^{\frac{2}{3}} \exp\left(-\frac{5800}{T}\right)$$

$$\exp\left(\frac{5800}{T}\right) \geqslant 430T^{\frac{3}{2}}$$

故

$$T = \frac{5800}{\frac{3}{2}\ln T + \ln 193}$$

上式必须用相关数值解的方法求 $T$。比较简单的方法是给 $T$ 一个初始值代入方程右边，可得出一个新的 $T$ 值。再将所得的 $T$ 值代回方程右边进行计算，如此反复循环。直至代进去的 $T$ 值与计算出来的 $T$ 值相等(或非常接近)为止，这时所得的 $T$ 值即为所求值。

| $T_n$(K) | $\ln T_n$ | $T_{n+1}$(K) |
|---|---|---|
| 300 | 5.04 | 419.8 |
| 419.8 | 5.97 | 405 |
| 405 | 6.09 | 406.6 |
| 406.6 | 6.01 | 406.3 |

由上表可见，$T=406.6$K 时，则为上面方程的解。即温度低于 406K 时样品便不呈现本征导电。

**【例 3-13】** 有一硅样品，施主浓度为 $N_D=2\times10^{14}\text{cm}^{-3}$，受主浓度为 $N_A=10^{14}\text{cm}^{-3}$，已知施主电离能 $\Delta E_D=E_c-E_D=0.05\text{eV}$，试求 99%的施主杂质电离时的温度。

**解：** 令 $n_D^+$ 表示电离施主的浓度，则电中性方程为

$$n_0+n_A=P_0+n_D^+$$

略去价带空穴的贡献，则得：$n_0=n_D^+-N_A$（受主杂质全部电离）

式中

$$n_0=N_c\exp\left(-\frac{E_c-E_F}{k_0T}\right)$$

对硅材料有

$$N_c=5.6\times10^{15}T^{\frac{3}{2}}$$

由题意可知：$n_D^+=0.99N_D$，则

$$0.99N_D-N_A=5.6\times10^{15}T^{\frac{3}{2}}\exp\left(-\frac{E_c-E_F}{k_0T}\right) \quad (1)$$

当施主有 99%的电离时，说明只有 1%的施主有电子占据，即 $f(E_D)=0.01$。

$$f(E_D)=\frac{1}{1+\frac{1}{2}\exp\frac{E_D-E_F}{k_0T}}=0.01$$

因为 $\exp\frac{E_D-E_F}{k_0T}=198$，所以 $E_F=E_D-kT\ln198$，代入式(1)得

$$0.99N_D-N_A=5.6\times10^{15}T^{\frac{3}{2}}\exp\left(-\frac{E_c-E_D+k_0T\ln198}{k_0T}\right)$$

取对数并加以整理即得到下面方程

$$T=\frac{579}{\frac{3}{2}\ln T-1.21}$$

按照例 3-12 中提供的方法可算得 $T=101.8$K。

**【例 3-14】** 设一 n 型半导体导带电子的有效质量 $m_n^*=m_0$，求在 300K 时，使费米能级 $E_F=\frac{1}{2}(E_c+E_D)$的施主浓度。设此时施主的电离很弱。

**解：** 一般情况下，施主杂质电离能比较小，要满足题设条件，则必须使半导体简并，为了计算简单，加之误差不大，仍可按非简并情况，故

$$n_0=N_c\exp\left(-\frac{E_c-E_F}{k_0T}\right)$$

$$N_c = \frac{2(2\pi m_n^* k_0 T)^{\frac{3}{2}}}{h^3}$$

又 $$n_D^+ = N_D \cdot [1 - f(E_D)] = \frac{N_D}{1 + 2\exp\left(-\frac{E_D - E_F}{k_0 T}\right)}$$

由电中性条件，$n_0 = n_D^+$，所以

$$N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_F}{k_0 T}\right) = \frac{N_D}{1 + 2\exp\left(-\frac{E_D - E_F}{k_0 T}\right)}$$

当施主电离很弱时，即$\frac{n_D^+}{N_D} \ll 1$，上式右边分母中 1 可以略去，即

$$N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_F}{k_0 T}\right) = \frac{N_D}{2} \exp\left(\frac{E_D - E_F}{k_0 T}\right)$$

$$E_F = \frac{1}{2}(E_c + E_D) + \frac{1}{2} k_0 T \ln \frac{N_D}{2N_c}$$

若要求使 $E_F = \frac{1}{2}(E_c + E_D)$，则 $N_D = 2N_c$。

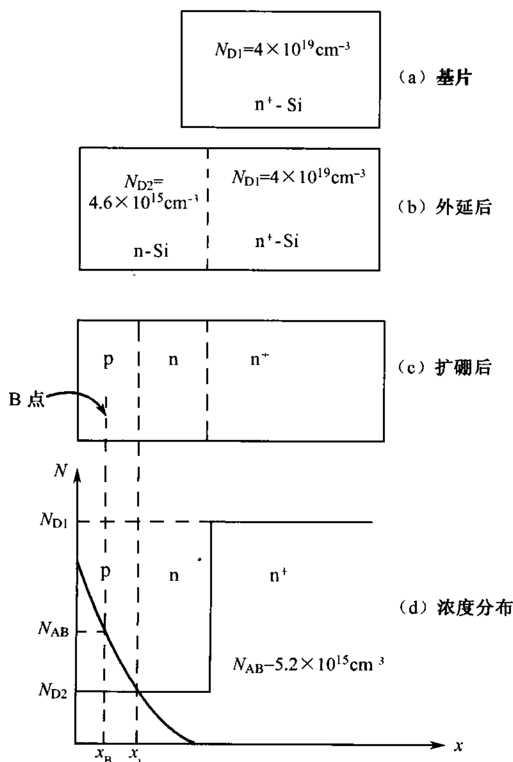



图 3-5 例 3-15 题用图

**【例 3-15】** 用外延生长和杂质高温扩散工艺制造一个二极管。基片 n 型 Si 的浓度是均匀的。外延生长层的浓度 $N_{D2}$ 也是均匀的。硼扩散的浓度表面高，里面低。如图 3-5(d)所示的分布。在 $x_j$ 处 $N_A = N_{D2}$。B 点的硼浓度为 $N_{AB}$，具体数值均如图 3-5 所示。已知室温时 $N_c = 2.8 \times 10^{19}\ \text{cm}^{-3}$，$N_v = 1.1 \times 10^{19}\ \text{cm}^{-3}$，$n_i = 1.3 \times 10^{10}\ \text{cm}^{-3}$；500K 时 $E_g = 1.0\text{eV}$，试回答下列问题。

(1) 求 300K 时扩硼前 n 区(外延层)费米能级 $E_F$ 的位置及电子和空穴的浓度。

(2) 试求室温时 B 点的 $E_F$ 的位置及电子和空穴的浓度。

(3) 在 500K 时 B 点处的电子浓度和空穴浓度各是多少?

(4) 如 $n^+$ 区掺入的是锑，在 Si 中的电离能为 0.039eV，若 300K 时 $E_F$ 在 $E_c$ 下面 0.026eV处，试求 $n^+$ 区的电子浓度。

**解：**(1) 300K 时扩硼前外延层的杂质浓度 $N_{D2} = 4.6 \times 10^{15}\ \text{cm}^{-3}$，因为 $N_{D2} <$

$10^{17}\text{cm}^{-3}$，而远大于室温时的本征浓度 $n_i=1.3\times10^{10}\text{cm}^{-3}$。所以是非简并情况的全电离区。故有

$$n_0 = N_{D2} = 4.6\times10^{15}(1/\text{cm}^3)$$

$$p_0 = \frac{n_i^2}{n_0} = \frac{(1.3\times10^{10})^2}{4.6\times10^{15}}$$

$$= 3.67\times10^4(1/\text{cm}^3)$$

由

$$n_0 = N_c\exp\left(-\frac{E_c-E_F}{k_0T}\right)$$

得

$$E_F = E_c + k_0T\ln\frac{n_{c0}}{N_c}$$

$$= E_c + 0.026\ln\frac{4.6\times10^{15}}{2.8\times10^{19}}$$

$$= E_c - 0.277(\text{eV})$$

(2) 现在求室温时 B 点的 $E_F$ 及 $n_0$ 与 $p_0$。

由题意已知 $N_{AB}=5.2\times10^{15}\text{cm}^{-3}$（受主），B 点的施主浓度为 $N_{D2}=4.6\times10^{15}\text{cm}^{-3}$，且 $N_{D2}<N_{AB}\ll10^{17}\text{cm}^{-3}$所以是有补偿的 p 型全电离区，费米能级 $E_F$ 为

$$E_F = E_v - k_0T\ln\frac{N_{AB}-N_{D2}}{N_v}$$

$$= E_v - 0.026\ln\frac{5.2\times10^{15}-4.6\times10^{15}}{1.1\times10^{19}}$$

$$= E_v + 0.255(\text{eV})$$

即 $E_F$ 在 $E_v$ 上 0.255eV 处。

$$p_0 = N_{AB} - N_{D2} = 5.2\times10^{15} - 4.6\times10^{15} = 6\times10^{14}(1/\text{cm}^3)$$

$$n_0 = \frac{n_i^2}{p_0} = \frac{(1.3\times10^{10})^2}{6\times10^{14}} = 2.82\times10^5(1/\text{cm}^3)$$

(3) 现在求 500K 时 B 点的 $n_0$ 和 $p_0$。

在 500K 时

$$N'_v = N_{v300}\left(\frac{500}{300}\right)^{3/2} = 1.1\times10^{19}\times2.152$$

$$= 2.37\times10^{19}(1/\text{cm}^3)$$

$$N'_c = N_{c300}\left(\frac{500}{300}\right)^{3/2} = 6.02\times10^{19}(1/\text{cm}^3)$$

$$n'_i = \sqrt{N'_vN'_c}\exp\left(-\frac{E_g}{2k_0T}\right)$$

$$= (2.37\times6.02)^{1/2}\times10^{19}\times\exp\left(-\frac{1\times300}{0.026\times500\times2}\right)$$

$$= 3.68\times10^{14}(1/\text{cm}^3)$$

因有效杂质浓度为 $N_{AB}-N_{D2}=6\times10^{14}\text{cm}^{-3}$，与 500K 时的 $n'_i$ 相近，所以 500K 时 B 点是处于过渡区。

所以可用

$$\begin{cases} n_0 p_0 = n_i^2 & (1) \\ p_0 = n_0 + (N_{AB} - N_{D2}) & (2) \end{cases}$$

由式(1)和式(2)得

$$p_0^2 - (N_{AB} - N_{D2})p_0 - n_i^2 = 0$$

$$p_0 = \frac{1}{2}[(N_{AB} - N_{D2}) + \sqrt{(N_{AB} - N_{D2})^2 + 4n_i^2}]$$

$$= \frac{1}{2}\left[6\times10^{14} + \sqrt{(6\times10^{14})^2 + 4\times(3.68\times10^{14})^2}\right]$$

$$= 7.75\times10^{14}(1/\text{cm}^3)$$

$$n_0 = \frac{n_i^2}{p_0} = 1.75\times10^{14}(1/\text{cm}^3)$$

(4) 已知 Si 中锑(Sb)的电离能为 0.039eV。$n^+$ 区的 $E_F=E_c-0.026\text{eV}$，求 $n^+$ 区的 $n_0$。

300K 时 $N_{D1}=4\times10^{19}\text{cm}^{-3}$，$N_v=2.8\times10^{19}\text{cm}^{-3}$ 显然 $N_D>N_v$，是属于简并情况，杂质未全电离

$$n_0 = n_D^+$$

$$= \frac{N_D}{1+2\exp\left(-\frac{E_D-E_F}{k_0T}\right)}$$

$$= \frac{N_D}{1+2\exp\left(-\frac{E_c-E_F}{k_0T}\right)\exp\frac{E_c-E_D}{k_0T}}$$

$$= \frac{4\times10^{19}}{1+2\exp\left(-\frac{0.026}{0.026}\right)\exp\frac{0.039}{0.026}}$$

$$= 9.3\times10^{18}(1/\text{cm}^3)$$

**【例 3-16】** 现有三块半导体硅材料，已知在室温下(300K)它们的空穴浓度分别为：$p_{01}=2.25\times10^{16}\text{cm}^{-3}$，$p_{02}=1.5\times10^{10}\text{cm}^{-3}$，$p_{03}=2.25\times10^{4}\text{cm}^{-3}$。

(1) 分别计算这三块材料的电子浓度 $n_{01}$、$n_{02}$、$n_{03}$；

(2) 判别这三块材料的导电类型；

(3) 分别计算这三块材料的费米能级的位置。

**解**：(1) 室温时硅的 $E_g=1.12\text{eV}$，$n_i=1.5\times10^{10}\text{cm}^{-3}$。根据载流子浓度乘积公式：$n_0p_0=n_i^2$ 可求出 $n_0=\frac{n_i^2}{p_0}$

$$n_{01}=\frac{n_i^2}{p_{01}}=\frac{(1.5\times10^{10})^2}{2.25\times10^{16}}=1\times10^4(1/\text{cm}^3)$$

$$n_{02}=\frac{n_i^2}{p_{02}}=\frac{(1.5\times10^{10})^2}{1.5\times10^{10}}=1.5\times10^{10}(1/\text{cm}^3)$$

$$n_{03}=\frac{n_i^2}{p_{03}}=\frac{(1.5\times10^{10})^2}{2.25\times10^{4}}=1\times10^{16}(1/\text{cm}^3)$$

(2) 由以上计算可知由于 $p_{01}>n_{01}$，故第一块为 p 型半导体；

$p_{02}=n_{02}=n_i$，故第二块为本征半导体；

$p_{01}<n_{02}$，故第三块为 n 型半导体。

(3) 当 $T=300\text{K}$ 时，$k_0T=0.026\text{eV}$，且由

$$p_0=n_i\exp\left(\frac{E_i-E_F}{k_0T}\right)$$

得
$$E_i-E_F=k_0T\ln\frac{p_0}{n_i}$$

对这三块材料分别计算如下：

(i)
$$E_i-E_F=0.026\ln\frac{2.25\times10^{16}}{1.5\times10^{10}}=0.026\times14.2=0.37(\text{eV})$$

即 p 型半导体的费米能级在禁带中线下 0.37eV 处。

(ii) 因为
$$n_{02}=p_{02}=n_i=1.5\times10^{10}(1/\text{cm}^3)$$

所以 $E_i-E_F=0$ 即费米能级位于禁带中心位置。

(iii) 对 n 型材料有
$$n_0=n_i\exp\left(\frac{E_F-E_i}{k_0T}\right)$$

故

$$E_F-E_i=k_0T\ln\frac{n_0}{n_i}=0.026\ln\frac{10^{16}}{1.5\times10^{10}}=0.026\times13.4=0.35(\text{eV})$$

即对 n 型材料，费米能级在禁带中心线上 0.35eV 处。

**【例 3-17】** 若锗中杂质电离能 $\Delta E_D=0.01\text{eV}$，施主杂质浓度分别为 $N_D=10^{14}\text{cm}^{-3}$ 及 $10^{17}\text{cm}^{-3}$，计算(1) 99%电离；(2) 90%电离；(3) 50%电离时温度各为多少？

**解：** 未电离杂质占的百分比为

$$D_-=\frac{2N_D}{N_c}\exp\frac{\Delta E_D}{k_0T}$$

求得
$$\frac{\Delta E_D}{k_0T}=\ln\frac{D_-N_c}{2N_D}$$

$$\frac{\Delta E_D}{k_0}=\frac{0.01}{1.38\times10^{-23}}\times1.6\times10^{-19}=116$$

$$N_c=\frac{2(2\pi m_n^*k_0)^{3/2}}{h^3}T^{3/2}=2\times10^{15}T^{3/2}(1/\text{cm}^3)$$

故

$$\frac{116}{T}=\ln\frac{D_{-}N_c}{2N_D}=\ln\left(\frac{D_{-}\times 2\times 10^{15}\times T^{3/2}}{2N_D}\right)$$

$$=\ln\left(\frac{10^{15}}{N_D}D_{-}\ T^{3/2}\right)$$

(1) $N_D=10^{14}\text{cm}^{-3}$,99%电离,即 $D_{-}=1-99\%=0.01$

$$\frac{116}{T}=\ln(10^{-1}T^{3/2})=\frac{3}{2}\ln T-2.3$$

即

$$\frac{116}{T}=\frac{3}{2}\ln T-2.3$$

将 $N_D=10^{17}\text{cm}^{-3}$,$D_{-}=0.01$ 代入得

$$\frac{116}{T}=\ln 10^{4}T^{3/2}=\frac{3}{2}\ln T-4\ln 10$$

即

$$\frac{116}{T}=\frac{3}{2}\ln T-9.2$$

(2) 90%时,$D_{-}=0.1$,由 $N_D=10^{14}\text{cm}^{-3}$,得

$$\frac{\Delta E_D}{k_0T}=\ln\frac{0.1N_c}{2N_D}$$

$$\frac{116}{T}=\ln\frac{0.1\times 2\times 10^{15}}{2N_D}T^{\frac{3}{2}}=\ln\frac{10^{14}}{N_D}T^{\frac{3}{2}}$$

$$\frac{116}{T}=\frac{3}{2}\ln T$$

由 $N_D=10^{17}\text{cm}^{-3}$得

$$\frac{116}{T}=\frac{3}{2}\ln T-3\ln 10$$

$$\frac{116}{T}=\frac{3}{2}\ln T-6.9$$

(3) 50%电离不能再用上式。因为

$$n_D=n_D^{+}=\frac{N_D}{2}$$

即

$$\frac{N_D}{1+\frac{1}{2}\exp\left(\frac{E_D-E_F}{k_0T}\right)}=\frac{N_D}{1+2\exp\left(-\frac{E_D-E_F}{k_0T}\right)}$$

故

$$\exp\left(\frac{E_D-E_F}{k_0T}\right)=4\exp\left(-\frac{E_D-E_F}{k_0T}\right)$$

$$\frac{E_D-E_F}{k_0T}=\ln 4-\frac{E_D-E_F}{k_0T}$$

即

$$E_F=E_D-k_0T\ln 2$$

$$n_0=N_c\exp\left(-\frac{E_c-E_F}{k_0T}\right)=\frac{N_D}{2}$$

取对数后得

$$\frac{E_c - E_D + k_0 T \ln 2}{k_0 T} = \ln \frac{N_D}{2N_c}$$

整理得下式

$$-\frac{\Delta E_D}{k_0 T} - \ln 2 = \ln \frac{N_D}{2N_c}$$

故

$$-\frac{\Delta E_D}{k_0 T} = \ln \frac{N_D}{N_c}$$

即

$$\frac{\Delta E_D}{k_0 T} = \ln \frac{N_c}{N_D}$$

当 $N_D = 10^{14}\text{cm}^{-3}$ 时，有

$$\frac{116}{T} = \ln \frac{2 \times 10^{15} \times T^{3/2}}{10^{14}}$$

$$= \ln(20T^{\frac{3}{2}}) = \frac{3}{2}\ln T + \ln 20$$

得

$$\frac{116}{T} = \frac{3}{2}\ln T + 3$$

当 $N_D = 10^{17}\text{cm}^{-3}$ 时

$$\frac{116}{T} = \frac{3}{2}\ln T - 3.9$$

此对数方程可用图解法或迭代法解出。

(A) 图解法：

令 $Y_1 = \frac{116}{T}$，列表如下：

| $T_1$ | 20K | 40K | 160K | 320K | 640K |
|---|---|---|---|---|---|
| $Y_1$ | 5.8 | 1.45 | 0.725 | 0.36 | 0.18 |

(i) 99%电离时：$N_D = 10^{14}\text{cm}^{-3}$，$\frac{116}{T} = \frac{3}{2}\ln T - 2.3$。令 $y_2 = \frac{3}{2}\ln T - 2.3$，则：

$T = 10\text{K}$ 时，$y_1 = 11.6$，$y_2 = 1.15$

$T = 320\text{K}$ 时，$y_1 = 0.36$，$y_2 = 6.35$

当温度 $T = 37.1\text{K}$，如图 3-6 所示。

$$N_D = 10^{17}(1/\text{cm}^3) \qquad \frac{116}{T} = -\ln T - 9.2$$

令 $y_2 = \frac{3}{2}\ln T - 9.2$，则：

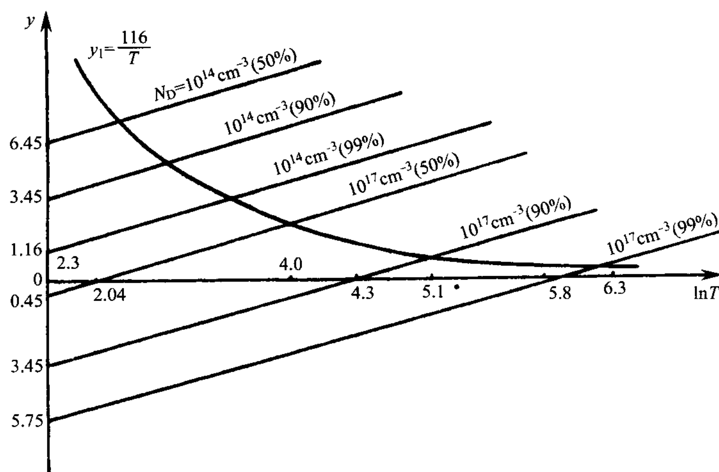



图 3-6　例 3-17 题用图

$T=10$K 时，$y_1=11.6$，$y_2=5.75$；

$T=320$K 时，$y_1=0.36$，$y_2=-0.55$。

由 $y_1$ 和 $y_2$ 两条曲线相交求得 $T=533$K，以下解法均相同。

(ii) 90%电离时

$$N_D=10^{14}(1/cm^3),\qquad \frac{116}{T}=\frac{3}{2}\ln T$$

令 $y_2=\frac{3}{2}\ln T$，则：$T=10$K 时，$y_2=3.45$；$T=80$K 时，$y_2=6.57$；由此求得 $T=24.3$K。

$$N_D=10^{17}(1/cm^3),\frac{116}{T}=\frac{3}{2}\ln T-6.9$$

令 $y_2=\frac{3}{2}\ln T-6.9$，则：$T=10$K 时，$y_2=3.45$；$T=320$K 时 $y_2=1.75$；由此求得：$T=160.5$K。

(iii) 50%电离时

$$N_D=10^{14}(1/cm^3),\qquad \frac{116}{T}=-\ln T+3$$

令 $y_2=\frac{3}{2}\ln T+3$，则：$T=10$K 时，$y_2=6.45$；$T=20$K 时，$y_2=7.5$；由此求得：$T=16$K。

$$N_D=10^{17}(1/cm^3),\qquad \frac{116}{T}=-\ln T-3.9$$

令 $y_2=\frac{3}{2}\ln T-3.9$，则：$T=10$K 时，$y_2=-0.45$；$T=320$K 时，$y_2=4.75$；由此求得：$T=55$K。

(B) 迭代法：

以 99%电离为例取 $N_D=10^{14}/cm^3$，得

$$\frac{116}{T}=\frac{3}{2}\ln T-2.3$$

解出 $T=\dfrac{116}{\frac{3}{2}\ln T-2.3}$，列表如下：

| $T_n^0$(K) | $\ln T_n$ | $T_{n+1}$(K) |
|---|---|---|
| 300 | 5.71 | 18.5 |
| 18.5 | 2.92 | 32.6 |
| 32.6 | 3.48 | 39.6 |
| 39.6 | 3.68 | 35.0 |
| 35.0 | 3.66 | 36.3 |
| 36.3 | 3.59 | 37.3 |
| 37.3 | 3.62 | 37.1 |
| 37.1 | 3.65 | 37.1 |

所以 $T=37.1$K。对其他情况可做类似处理。

**【例 3-18】** 在一掺硼的非简并 p 型硅中，含有一定浓度的铟，室温下测出空穴浓度 $p_0=1.1\times10^{16}cm^{-3}$。已知掺硼浓度 $N_{A1}=10^{16}cm^{-3}$其电离能 $\Delta E_{A1}=E_{A1}-E_v=0.046eV$，铟的电离能 $\Delta E_{A2}=E_{A2}-E_v=0.16eV$，试求这种半导体中含铟的浓度。室温下硅的$N_v=1.04\times10^{19}cm^{-3}$。

**解**：对非简并 p 型硅。有

$$p_0=N_v\exp\left(-\frac{E_F-E_v}{k_0T}\right)$$

$$E_F=E_v+k_0T\ln\frac{N_v}{p_0}$$

代入数据

$$E_F=E_v+0.026\ln\frac{1.04\times10^{19}}{1.1\times10^{16}}$$

故

$$E_F=E_v+0.178(eV)$$

由题中可知

$$E_F-E_{A1}=0.178-0.045=0.133(eV)$$

$$E_F-E_{A2}=0.178-0.16=0.018(eV)$$

价带空穴 $p_0$ 是由两种杂质电离后提供的，即

$$p_0 = \frac{N_{A1}}{1+2\exp\left(\frac{E_{A1}-E_F}{k_0T}\right)} + \frac{N_{A2}}{1+2\exp\left(\frac{E_{A2}-E_F}{k_0T}\right)}$$

故
$$N_{A2} = \left[p_0 - \frac{N_{A1}}{1+2\exp\left(\frac{E_{A1}-E_F}{k_0T}\right)}\right]\left[1+2\exp\left(\frac{E_{A2}-E_F}{k_0T}\right)\right]$$

代入已知数据 $N_{A2}=2.2\times10^{15}\text{cm}^{-3}$，即半导体中含铟的浓度为 $2.2\times10^{15}\text{cm}^{-3}$。

**【例 3-19】** 证明补偿型 n 型半导体中，在杂质电离区，当 $n\gg N_A$ 时，下面的关系式成立：

$$\frac{n(n+N_A)}{N_D-N_A-n} = \frac{N_c}{g_D}\exp(-\Delta E_D/k_0T) \tag{1}$$

**解**：对于补偿的半导体，同时含有施主杂质和受主杂质。在低温下，由价带和施主提供的总电子数为 $p+N_D-n_D^+$。补偿时，这些电子一部分填充受主能级，数量为 $N_A-P_A^-$（受主上的空穴浓度），另一部分激发到导带，数量为 $n$。故电中性条件为

$$n+N_A-P_A^- = p+N_D-n_D^+ \tag{2}$$

即由价带和施主提供的电子，必须等于受主和导带接受的电子。实际上，上面式子中的 $P_A^-$ 和 $p$ 都是可以忽略的，因为只要 $N_D-N_A\gg N_A$，施主最多只是部分电离，费米能级在 $E_D$ 上下，故电中性条件可以写为

$$n+N_A = N_D-n_D^+ \tag{3}$$

当 $n\gg N_A$ 时，$n=N_D-n_D^+$，这与单一杂质在弱电离时的情况相似，施主能级被空穴占据的概率为

$$1-f_D = \frac{1}{1+g_D\exp\left(\frac{E_F-E_D}{k_0T}\right)} \tag{4}$$

$g_D$ 为施主杂质的简并度。所以可得

$$N_D-n_D^+ = (1-f_D)N_D = \frac{N_D}{1+g_D\exp\left(\frac{E_F-E_D}{k_0T}\right)}$$

于是把式(3)的电中性条件写成

$$n+N_A = \frac{N_D}{1+g_D\exp\left(\frac{E_F-E_D}{k_0T}\right)} \tag{5}$$

由于 $E_D-E_F=E_c-E_F-\Delta E_D$ 且

$$n = N_c\exp[-(E_c-E_F)/k_0T]$$

代入式(5)中，得到

$$n+N_A = \frac{N_D}{1+g_D\frac{n}{N_c}\exp(\Delta E_D/k_0T)}$$

$$\frac{N_D}{n+N_A}=1+g_D\frac{n}{N_c}\exp(\Delta E_D/k_0T)$$

$$\frac{N_D-N_A-n}{(N_A+n)n}=\frac{g_D}{N_c}\exp(\Delta E_D/k_0T)$$

故

$$\frac{(N_A+n)n}{N_D-N_A-n}=\frac{N_c}{g_D}\exp(-\Delta E_D/k_0T)$$

即得证之。

**【例 3-20】** 证明强简并条件下确定费米能级位置的表达式为

$$E_F-E_c=\frac{h^2}{2m_n}\left(\frac{3n}{8\pi}\right)^{3/2}$$

**证明：** 在强简并情况下，$E_F-E_c/k_0T\gg1$，能带内的电子分布与金属中的电子分布情况相接近。即在 $E_F$ 以下大部分能量范围内能级被电子占满，只是在 $E_F$ 上下 $k_0T$ 数量级的能量范围内能级是部分占满的。可以近似的认为 $E_F$ 以下的能级全部占满，而 $E_F$ 以上能级全是空的。

简并半导体载流子浓度 $n$ 的计算公式为

$$n=N_c\frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^\infty\frac{x^{1/2}}{1+\exp(x-\zeta)}dx$$

若设 $A=\frac{1}{1+\exp(x-\zeta)}$，$x=E-E_c/k_0T$，$\zeta=E_F-E_c/k_0T$，当 $\zeta<x$ 时，$E_F-E_c<E-E_c$，此时相当于在 $E_F$ 以上的能级，则 $A$ 可为零。当 $\zeta>x$ 时，相当于费米能级以下的能级，$A=1$。所以

$$n\approx N_c\frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^\zeta x^{\frac{1}{2}}dx=\frac{4}{3\sqrt{\pi}}N_c\zeta^{\frac{3}{2}}=\frac{4}{3\sqrt{\pi}}N_c\left[\frac{(E_F-E_c)}{k_0T}\right]^{\frac{3}{2}}$$

由于

$$N_c=\frac{2}{h^3}(2\pi m_n^*k_0T)^{3/2}$$

$$n=\frac{8\pi}{3}\times\frac{1}{h^3}(2m_n^*)^{3/2}(E_F-E_c)^{3/2}$$

故

$$E_F-E_c=\left(\frac{3n}{8\pi}\right)^{3/2}h^2\frac{1}{2m_n^*}$$

**【例 3-21】** Ge，Si 价带中起作用的能带是极值相重合的两个能带，对应有轻空穴有效质量 $m_{pl}$ 和重空穴有效质量 $m_{ph}$，试证：价带顶状态密度有效质量

$$m_{dp}=(m_{pl}^{3/2}+m_{ph}^{3/2})^{2/3}$$

**解：** Ge，Si 价带顶等能面为扭曲面，在计算状态密度时近似等效为球形等能面，其价带顶附近状态密度

$$g_v(E)=4\pi V\frac{(2m_{dp}^*)^{3/2}}{h^3}(E_v-E)^{\frac{1}{2}}\tag{1}$$

因为价带顶对应有极大值重合的两个能带，即

$$E_{v1} = E_v - \frac{h^2 k^2}{2m_{pl}} \qquad E_{v2} = E_v - \frac{h^2 k^2}{2m_{ph}}$$

所以

$$g_{v1}(E) = \frac{4\pi V(2m_{pl})^{\frac{3}{2}}}{h^3}(E_{v1} - E)^{\frac{1}{2}} \tag{2}$$

$$g_{v2}(E) = \frac{4\pi V(2m_{ph})^{\frac{3}{2}}}{h^3}(E_{v2} - E)^{\frac{1}{2}} \tag{3}$$

又因为

$$g_v(E) = g_{v1}(E) + g_{v2}(E)$$

得

$$(m_{dp}^*)^{\frac{3}{2}} = m_{pl}^{\frac{3}{2}} + m_{ph}^{\frac{3}{2}}$$

即

$$m_{dp}^* = (m_{pl}^{\frac{3}{2}} + m_{ph}^{\frac{3}{2}})^{\frac{2}{3}}$$

# 第 4 章　半导体的导电性

**主题词：**

迁移率，电离杂质散射，晶格振动散射，电导有效质量，电导率（电阻率）与温度即杂质浓度的关系，强电场效应，热载流子，GaAs 的负微分电导，耿氏效应。

## 4.1　理论概要与重点分析

（1）物体中载流子在电场作用下做定向运动形成电流。设电场强度为 $E$，电子浓度为 $n$，平均漂移速度为$\bar{v}_d$，则导体产生的电流密度

$$j = nq\bar{v}_d = nq\mu E = \sigma E \tag{4.1}$$

其中

$$\sigma = nq\mu \tag{4.2}$$

为导体的电导率。载流子平均漂移速度$\bar{v}_d = \mu E$，则 $\mu = \frac{|\bar{v}_d|}{|E|}$是电子的迁移率，一般取正值。可见迁移率是指在单位电场作用下，电子的平均漂移速度。也可以说迁移率是反映物体中载流子在电场作用下做定向运动难易程度的物理量。

（2）半导体中有两种载流子——电子和空穴，它们的迁移率不同，分别用 $\mu_n$，$\mu_p$ 表示。则：

电子电流　$j_n = nq\mu_n E = \sigma_n E$　(4.3)

空穴电流　$j_p = pq\mu_p E = \sigma_p E$　(4.4)

总电流　$j = j_n + j_p = (nq\mu_n + pq\mu_p)E = \sigma E$　(4.5)

总电导率　$\sigma = nq\mu_n + pq\mu_p$　(4.6)

对强 n 型　$n \gg p$，　$\mu_n \sim \mu_p$，　$\sigma = nq\mu_n$　(4.7)

对强 p 型　$p \gg n$，　$\sigma = pq\mu_p$　(4.8)

本征型　$n = p = n_i$，　$\sigma_i = n_i q(\mu_n + \mu_p)$　(4.9)

电阻率是电导率的倒数，所以有：

n 型

$$\rho = \frac{1}{nq\mu_n} \tag{4.10}$$

p 型

$$\rho = \frac{1}{pq\mu_p} \tag{4.11}$$

在两种载流子共存，且任意一种都不可忽略的一般情况下，电阻率为

$$\rho = \frac{1}{nq\mu_n + pq\mu_p} \tag{4.12}$$

由于半导体的电阻率能用四探针法很方便地测量，所以常用它作为半导体的重要性

能参量。

(3) 由上可见，分析半导体的导电性，应从载流子浓度和迁移率两方面入手。而载流子浓度问题在第3章中做了系统的讨论，在这里应用时，应全面考虑。而迁移率的问题是本章的重点。

迁移率是载流子在晶体中运动时不断遭受到各种散射因素的作用决定的。半导体中的主要散射机构是电离杂质散射和晶格振动散射。而晶格振动散射又以长纵声学波和光学波的散射为主。散射作用的强弱用散射概率 $p$(或平均自由时间 $\tau=\frac{1}{p}$)来衡量，它表示单位时间内一个载流子遭受到散射的次数。经分析，几种主要的散射机构单独决定的散射概率与杂质浓度 $N_i$ 和温度 $T$ 有如下的关系：

电离杂质散射 $$p_i \propto N_i T^{-\frac{3}{2}} \tag{4.13}$$

长纵声学波散射 $$p_s \propto T^{\frac{3}{2}} \tag{4.14}$$

长纵光学波散射 $$p_o \propto \frac{(h\nu_l)^{\frac{3}{2}}}{(k_0 T)^{\frac{1}{2}}}\left[\frac{1}{\exp\left(\frac{h\nu_l}{k_0 T}\right)-1}\right]\frac{1}{f\left(\frac{h\nu_l}{k_0 T}\right)} \tag{4.15}$$

其中 $h\nu_l$ 为声子能量。

其他因素引起的散射还有：等同能谷间散射、缺陷和位错散射、中性杂质散射以及载流子之间的散射等。

(4) 通过对外加电场下载流子的平均漂移速度的计算，可得到载流子的迁移率与平均自由时间 $\tau$ 的关系：

电子 $$\mu_n = \frac{q\tau_n}{m_{cn}^*} \tag{4.16}$$

空穴 $$\mu_p = \frac{q\tau_p}{m_{cp}^*} \tag{4.17}$$

式中 $$m_{cn}^* = \frac{3m_t m_l}{m_t + 2m_l}, \qquad m_{cp}^* = \frac{(m_p^*)_l^{\frac{3}{2}} + (m_p^*)_h^{\frac{3}{2}}}{(m_p^*)_l^{\frac{1}{2}} + (m_p^*)_h^{\frac{1}{2}}} \tag{4.18}$$

分别为电子和空穴的电导有效质量；$\tau_n$、$\tau_p$ 是各种散射机构所决定的电子和空穴的平均自由时间。

总散射概率是各种散射机构所决定的散射概率之和，即 $P=P_{\mathrm{I}}+P_{\mathrm{II}}+P_{\mathrm{III}}+\cdots$，在Si、Ge等原子性晶体中，起主要作用的是电离杂质散射和长纵声学波的散射。由它们所决定的迁移率与温度及杂质浓度的关系为

$$\mu = \frac{q}{m_c^*}\left(\frac{1}{AN_i T^{-\frac{3}{2}} + BT^{\frac{3}{2}}}\right) \tag{4.19}$$

由此可以定性地解释半导体中迁移率随杂质浓度和温度的变化规律，进而再结合载流子浓度随杂质浓度和温度的变化，可解释电阻率随杂质浓度和温度的变化。

(5) 半导体在外加电磁场的作用下，电子的分布函数要发生变化，稳态时分布函数的

变化满足玻尔兹曼方程。

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{s} = v \cdot \nabla_{r} f + \dot{\boldsymbol{k}} \cdot \nabla_{k} f \tag{4.20}$$

如果系统内部没有温度梯度，$f$ 不随位置 $r$ 变化，可简化为

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{s} = \dot{\boldsymbol{k}} \cdot \nabla_{k} f \tag{4.21}$$

求解这一微分积分方程，一般用弛豫时间近似的方法。由此，式(4.21)可变为

$$\dot{\boldsymbol{k}} \cdot \nabla_{k} f = -\frac{f - f_0}{\tau} \tag{4.22}$$

它表示一种弛豫过程：如果将外场取消，由于散射作用，可使分布函数 $f$ 逐渐恢复到平衡的分布函数 $f_0$，$\tau$ 为弛豫时间。

实际上载流子是有一定的速度统计分布的。在考虑了这个问题以后，在弱电场和球形等能面的情况，利用弛豫时间近似对半导体电导率进行修正后得到

$$\sigma = \frac{nq^2 \langle \tau v^2 \rangle}{m_{cn}^* \langle v^2 \rangle} \tag{4.23}$$

迁移率

$$\mu_{n} = \frac{q}{m_{cn}^*} \frac{\langle \tau v^2 \rangle}{\langle v^2 \rangle} \tag{4.24}$$

在只有长声学波散射时，可计算出

$$\mu_{n} = \frac{4ql_{n}}{3\sqrt{2\pi m_{cn}^* k_0 T}} \tag{4.25}$$

式中，$l_n$ 为电子的平均自由程。

(6) 在强电场作用下，载流子的平均漂移速度不再与电场强度成正比。随着电场强度的增加，漂移速度的增加比线性变得缓慢，最后达到一个饱和值。很显然，这时的迁移率变得与电场有关，这一物理现象可用热载流子与光学波的晶格散射概念予以解释。

当电场很强时，载流子从电场中获得的能量，无法很快以声学声子的形式释放给晶格，使其平均能量高出晶格系统的能量，即载流子的有效温度 $T_e$，比晶格温度 $T$ 高。设弱电场时电子迁移率为 $\mu_0$，用式(4.25)表示，则在强电场时 $\mu$ 与 $\mu_0$ 之比

$$\frac{\mu}{\mu_0} = \sqrt{\frac{T}{T_e}} \tag{4.26}$$

可见随着电场的加强，$T_e$ 比 $T$ 高得越多，载流子的迁移率会变得越小。当电场进一步增强时，电子从电场获得多余能量可全部以光学声子的形式释放给晶格。从而使漂移速度达到饱和。

(7) 由于 GaAs 的导带具有多能谷结构，而最低能谷和次低能谷间的能量间隔较小，当电场强度达到一定程度时，最低能谷中电子从电场中获得能量后，使其与次低能谷的能量相当。即会发生谷间散射，低能谷中的电子向高能谷中转移，且随电场强度的进一步增加，转移的电子越多，高能谷中电子的有效质量远大于低能谷的有效质量，因而在这个区域内会出现微分负电导现象。

$$\frac{dJ}{d|\mathscr{E}|}=nq\frac{dv_d}{d|\mathscr{E}|}<0,\qquad 即\frac{dv_d}{d|\mathscr{E}|}<0 \tag{4.27}$$

电子的迁移率为负值。在这个区域中电子的平均漂移速度随电场的增加而减小。

根据微分负阻理论,可对 GaAs 中出现的耿氏效应得到较为满意的解释。

## 4.2 概念思考与练习题

**【4-1】** 试从经典和量子理论分别说明散射的物理意义。

**【4-2】** 根据散射的物理模型,说明为什么电离杂质散射使 Ge、Si 等原子半导体迁移率 $\mu\propto T^{3/2}$,而晶格振动散射使迁移率 $\mu\propto T^{-3/2}$。

**【4-3】** 什么是声子? 它对半导体材料的电导起什么作用?

**【4-4】** 强电场作用下,迁移率的数值与场强 $E$ 有关,这时欧姆定律是否仍然成立? 为什么?

**【4-5】** 半导体的电阻温度系数是正的还是负的? 为什么? 分别说明本征和掺杂(非简并)情况。

**【4-6】** 有一块本征半导体样品,试描述用以增加其电导率的两个物理方法。

**【4-7】** 如图 4-1 所示,说明 $\mu\sim T$ 曲线的变化规律,并指出在什么温度范围内电离杂质散射起主要作用,指出两根曲线为什么在低温下分开,而在高温时趋于一致。

**【4-8】** 如果有相同电阻率的掺杂 Ge 和 Si 半导体,问哪一个材料的少子浓度高? 为什么?

**【4-9】** 如果在非恒温的环境测量,发现工厂生产超纯硅的室温电阻率总是夏天低、冬天高。试述其原因,这与图 4-2 关系是否矛盾? 为什么?

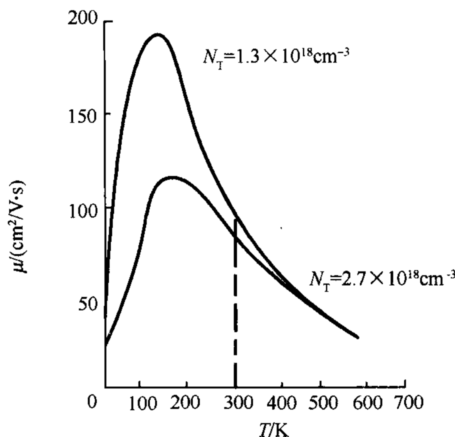



图 4-1 题 4-7 用图

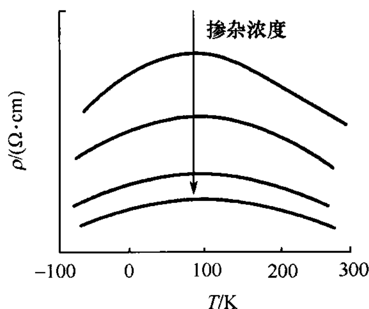



图 4-2 题 4 9 用图

**【4-10】** 试说明纵光学波散射和纵声学波散射的物理机制。各在什么样的晶体中起主要作用?

【4-11】 说明本征 $G_e$ 和 Si 中载流子迁移率随温度增加如何变化。

【4-12】 何谓电导有效质量。它和状态密度有效质量有何区别？它与电子的纵有效质量和横有效质量的关系如何？

【4-13】 对于仅含一种杂质的锗样品，如果要确定载流子类型、浓度、迁移率和有效质量，应进行哪些测量？

【4-14】 解释多能谷散射如何影响材料的导电性？

【4-15】 为什么要引入热载流子概念？热载流子和普通载流子有何区别？

【4-16】 什么是负微分电导现象？以砷化镓为例说明产生这种现象的基本条件。

【4-17】 耿氏器件中高场畴是如何形成的？为什么当畴外电场降低到如图 4-3 中的 $E_a$ 时，畴区电荷不再增加，而处于稳定状态？根据图 4-3 说明耿氏振荡的原理。

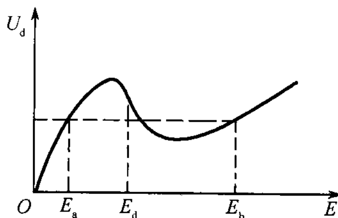



图 4-3　题 4 17 用图

【4-18】 写出玻尔兹曼方程，并解释方程中每一项的物理意义。说明在什么条件下可以用驰豫时间近似。

【4-19】 证明方程 $N(t)=N_0e^{-\frac{t}{\tau}}$ 中的 $\tau$ 代表两次散射之间的平均自由时间。

【4-20】 假设 Ge 中电子（$\mu_n=3900\text{cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$）具有的热能量为 $k_0T$，相应的热运动速度用 $E_{th}=\frac{1}{2}m_0v_{th}^2$ 计算。(1)若将样品置于强度为 10V/cm 的电场中，说明此时电子的漂移速度小于热运动速度。(2)若将样品置于 $10^4$V/cm 的电场中，用同样的迁移率数值，计算强电场下对真实迁移率的影响。

【4-21】 图 4-4(a)、(b)分别画出了载流子浓度和迁移率随温度 $T$ 变化的关系，试将曲线变化规律予以定性解释，并根据图(a)、(b)中的曲线画出图(c)中的曲线（设 n 型掺杂）。

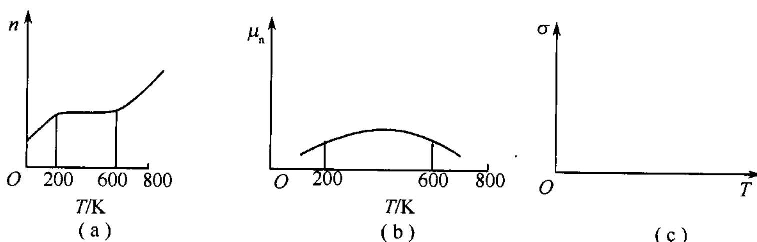



图 4-4　题 4 21 用图

【4-22】 有 4 块 Si 半导体样品，除掺杂浓度不同外，其余条件均相同。根据下列所给数据判断哪块样品的电阻率最大？哪块样品的电阻率最小？

(1) $N_A=1.2\times10^{15}\text{cm}^{-3}$，$N_D=8\times10^{14}\text{cm}^{-3}$；

(2) $N_A=8\times10^{14}\text{cm}^{-3}$，$N_D=1.2\times10^{15}\text{cm}^{-3}$；

(3) $N_A=4\times10^{14}\text{cm}^{-3}$；

(4) $N_D=4\times10^{14}\text{cm}^{-3}$。

**【4-23】** 长波光学声子和长波声学声子的主要区别是什么？电子在同一能谷中的散射主要吸收和发射什么声子？

**【4-24】** 强电场下，n 型 GaAs 和 n 型 Si 中电子漂移速度随电场变化的规律有何不同？导致这一差别的根本原因是什么？

**【4-25】** 半导体中如果同时存在着施主杂质和受主杂质并且杂质全部电离时，说明为什么在室温下其载流子浓度为两者之差，而对迁移率的影响却是两者之和？

## 4.3 典型例题解析

**【例 4-1】** 室温下，本征锗的电阻率为 47Ω·cm，试求本征载流子浓度。若掺入锑杂质，使每 $10^6$ 个锗原子中有一个杂质原子，计算室温下电子浓度和空穴浓度。设杂质全部电离。锗原子的浓度为 $4.4\times10^{22}/\text{cm}^3$，试求该掺杂锗材料的电阻率。设 $\mu_n=3600\text{cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$，$\mu_p=1700\text{cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$且认为不随掺杂而变化。$n_i=2.5\times10^{13}\text{cm}^{-3}$。

**解：** 本征半导体的电阻率表达式为

$$\frac{1}{\rho}=n_i q(\mu_n+\mu_p)$$

所以

$$n_i=\frac{1}{\rho q(\mu_n+\mu_p)}=\frac{1}{47\times1.6\times10^{-19}\times(3600+1700)}=2.5\times10^{13}(1/\text{cm}^3)$$

施主杂质原子的浓度

$$N_D=(4.4\times10^{22})\times10^{-6}=4.4\times10^{16}(1/\text{cm}^3)$$

故

$$n_0=N_D=4.4\times10^{16}(1/\text{cm}^3)$$

$$p_0=\frac{n_i^2}{n_0}=\frac{(2.5\times10^{13})^2}{4.4\times10^{16}}=1.42\times10^{10}(1/\text{cm}^3)$$

其电阻率

$$\rho_n=\frac{1}{n_0 q\mu_n}=\frac{1}{4.4\times10^{16}\times1.6\times10^{-19}\times3600}$$

所以

$$\rho_n=4\times10^{-2}(\Omega\cdot\text{cm})$$

**【例 4-2】** (1) 试说明在室温下，某半导体的电子浓度 $n=n_i\sqrt{\mu_p/\mu_n}$时，其电导率 $\sigma$ 为最小值。式中 $n_i$ 是本征载流子浓度，$\mu_p$、$\mu_n$ 分别为空穴和电子的迁移率。试求在上面条件时空穴浓度。

(2) 当 $n_i=2.5\times10^{13}\text{cm}^{-3}$，$\mu_p=1900\text{cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$，$\mu_n=3800\text{cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$时，试求锗的本征电导率和最小电导率。

(3) 试问当 $n_0$ 和 $p_0$(除了 $n_0=p_0=n_i$ 以外)为何值时,该晶体的电导率等于本征电导率?

**解:**(1) 因为 $\sigma=n_0q\mu_n+p_0q\mu_p$,又因 $n_0p_0=n_i^2$,所以 $\sigma=n_0q\mu_n+\frac{n_i^2}{n_0}q\mu_p$。则

$$\frac{d\sigma}{dn_0}=q\mu_n-\frac{n_i^2}{n_0^2}q\mu_p$$

令 $\frac{d\sigma}{dn_0}=0$,得:$n_0=n_i\sqrt{\mu_n/\mu_n}$。

又因为 $\frac{d\sigma^2}{dn_0^2}=2\frac{n_i^2}{n_0^3}q\mu_p>0$,所以,当 $n_0=n_0\sqrt{\mu_p/\mu_n}$时,电导率 $\sigma$ 取得最小值。

空穴浓度 $$p_0=\frac{n_i^2}{n_0}=n_i\sqrt{\mu_n/\mu_p}$$

对本征锗
$$\begin{aligned}\sigma_i&=n_iq(\mu_n+\mu_p)\\&=2.5\times10^{13}\times1.6\times10^{-19}\times(1900+3800)\\&=2.28\times10^{-2}(\mathrm{S/cm})\end{aligned}$$

(2) 在最小电导率条件下

$$\begin{aligned}\sigma_{\min}&=n_iq\sqrt{\mu_n/\mu_p}\cdot\mu_p+n_iq\sqrt{\mu_p/\mu_n\cdot\mu_n}\\&=2n_iq\sqrt{\mu_n\mu_p}\end{aligned}$$

代入数据

$$\begin{aligned}\sigma_{\min}&=2\times2.5\times10^{13}\times1.6\times10^{-19}\times\sqrt{3800\times1900}\\&=2.12\times10^{-2}(\mathrm{S/cm})\end{aligned}$$

(3) 当材料的电导率等于本征电导率时,有

$$n_0q\mu_n+\frac{n_i^2}{n_0}q\mu_p=n_iq(\mu_n+\mu_p)$$

即
$$n_0^2\mu_n-n_0n_i(\mu_n+\mu_p)+n_i^2\mu_p=0$$

解得
$$n_0=\frac{n_i(\mu_n+\mu_p)\pm\sqrt{n_i^2(\mu_n+\mu_p)^2-4\mu_n\mu_pn_i^2}}{2\mu_n}$$

代入数据
$$n_0=\frac{n_i}{4}(3\pm1)$$

因为,$n_0\neq n_i$,所以有

$$n_0=\frac{n_i}{2}=1.25\times10^{13}(1/\mathrm{cm}^3)$$

$$p_0=\frac{n_i^2}{n_0}=5\times10^{13}(1/\mathrm{cm}^3)$$

显然,此材料是 p 型材料。

**【例 4-3】** 准经典近似下,确定金属中电子漂移速度的方程为

$$m\left(\frac{dv}{dt}+\frac{v}{\tau}\right)=-e\mathscr{E}$$

式中 $\tau$ 为弛豫时间。设电场 $\mathscr{E}$ 为交变电场：$\varepsilon=\varepsilon_0 e^{i\omega t}$，试证在频率 $\omega$ 下的金属电导率为

$$\sigma(\omega)=\frac{1+i\omega\tau}{1+(\omega\tau)^2}\sigma(0)$$

式中 $\sigma(0)$ 为恒稳电场下电导率。

**证明**：按题意，电子运动方程写为

$$\frac{dv}{dt}+\frac{v}{\tau}=-\frac{e}{m}\varepsilon_0 e^{-i\omega t} \tag{1}$$

其齐次方程：$dv/dt+v/\tau=0$ 的通解为

$$v=ce^{-t/\tau}$$

设非齐次方程的特解为 $v=Ae^{-i\omega t}$，代入式(1)得

$$-i\omega Ae^{-i\omega t}+\frac{A}{\tau}e^{-i\omega t}=-\frac{e}{m}e^{-i\omega t}$$

求出特解的特定系数 $A=-e\varepsilon_0\tau/m(1-i\omega\tau)$，因而非齐次方程的通解为

$$\begin{aligned}v&=ce^{-t/\tau}+Ae^{-i\omega\tau}\\&=ce^{-t/\tau}-\frac{e\varepsilon_0\tau}{m}\frac{e^{-i\omega t}}{1-i\omega\tau}\end{aligned}$$

式中第一项表示电子在电场作用下的弛豫过程，随时间迅速衰减，对电流无贡献。只需考虑第二项。

设电子密度为 $n$，则在电场作用下的电流密度

$$j(\omega)=-nev=\frac{ne^2\tau}{m}\frac{\varepsilon_0 e^{-i\omega t}}{1-i\omega\tau}=6(\omega)\varepsilon$$

所以电导率

$$\sigma(\omega)=\frac{ne^2\tau}{m}\frac{1}{1-i\omega\tau}=\sigma(0)\frac{1+i\omega\tau}{1+(\omega\tau)^2}$$

其中 $\sigma(0)=ne\tau/m$ 是恒稳电场($\omega=0$)中金属电导率。

**【例 4-4】** 由一块本征半导体锗，测得如下数据：

| $T$(K) | 333 | 385 | 455 | 566 | 714 |
|---|---|---|---|---|---|
| $\sigma(1/\Omega\cdot cm)$ | 7.4 | 36 | 164 | 770 | 4400 |

求锗的禁带宽度。假设 $E_g$ 与温度无关，空穴与电子的迁移率与温度的关系为 $\mu=$常数$\times T^{-3/2}$。

**解**：对于本征锗材料，满足关系式

$$\sigma_i=n_i q(\mu_n+\mu_p)$$

$$n_i=A_1T^{3/2}\exp(-E_g/2k_0T)$$

由于 $\mu=A_2T^{-3/2}$，故

$$\sigma_i=A_2\exp(-E_g/2k_0T)$$

式中，$A_1$、$A_2$、$A_3$ 为常数，取对数

$$\ln\sigma_i = \ln A_3 - E_g/2k_0T$$

按题意将原来的数据作成 $\ln\sigma_i$ 与 $1/T$ 关系图，可得到如下一组数据和图 4-5。

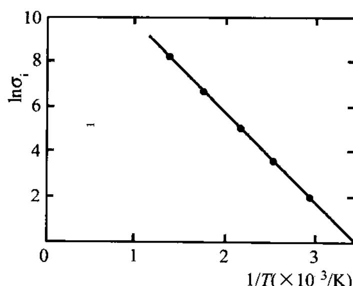



图 4-5　$\ln\sigma_i$ 与 $1/T$ 的关系曲线

| $1/T(\times10^{-3}/\mathrm{K})$ | 3.0 | 2.6 | 2.2 | 1.8 | 1.4 |
|---|---|---|---|---|---|
| $\ln\sigma_i$ | 2 | 3.6 | 5.1 | 6.6 | 8.4 |

由此可求得该直线的斜率为$-4\times10^3$，即

$$E_g = 2k_0 \times 4000 = 0.69(\mathrm{eV})$$

**【例 4-5】** 在室温下，高纯锗的电子迁移率 $\mu_n=3900\mathrm{cm}^2/(\mathrm{V}\cdot\mathrm{s})$。设电子的有效质量 $m_n=0.3m\approx3\times10^{-28}\mathrm{g}$，试计算：

(1) 热运动速度平均值 $\bar{v}$(取方均根速度)；

(2) 平均自由时间 $\tau$；

(3) 平均自由路程 $l$；

(4) 在外加电场为 10V/cm 时的漂移速度 $v_d$，并简单讨论(3)和(4)中所得的结果。

**解**：(1) 用方均根速度作为热运动平均速度的近似值

$$\bar{v}=\left(\frac{3kT}{m_n}\right)^{1/2}=\left(\frac{3\times0.026\times1.6\times10^{-12}}{3\times10^{-28}}\right)^{1/2}$$

$$\approx2.0\times10^7(\mathrm{cm/s})$$

(2) 利用迁移率的表示式

$$\mu_n=\frac{e\tau}{m_n}$$

平均自由时间

$$\tau=\mu_n\frac{m_n}{e}=0.39\times\frac{3\times10^{-31}}{1.6\times10^{-19}}\approx7.5\times10^{-13}(\mathrm{s})$$

(3) 平均自由路程

$$l=\bar{v}\tau=2.0\times10^7\times7.5\times10^{-13}=1.5\times10^{-5}(\mathrm{cm})$$

上述结果表明，电子的平均自由路程相当于数百倍的晶格间距($\approx10^{-8}$cm)。这说明半导体中电子散射的机构不能用经典理论来说明，因为按照经典理论，电子的散射是由于电子和晶体中原子的碰撞，所以 $l$ 比晶格间距大很多倍就不好理解了。但是根据量子理

论，尽管晶体中的电子是在密集的原子之间运动，只要这些原子按照严格的周期性排列，电子运动并不受到散射，引起散射效应的是晶体的不完整性（或者说势场的周期性被破坏），而不是晶格本身，因此上面的结果就不足为怪了。

（4）电子沿着与电场相反的方向做漂移运动，漂移速度

$$v_d = -\mu_n \mathscr{E} = -3900 \times 10 = -3.9 \times 10^4 \text{cm/s}$$

可见，$v_d \ll v$，即漂移速度远小于热运动速度。这说明电子在运动过程中频繁地受到散射，在电场中积累起来的速度变化是较小的。

**【例 4-6】** 在室温下，为了把电阻率为 0.2Ω·cm 的 p 型硅片变成：（1）电阻率为 0.1Ω·cm 的 p 型硅片；（2）电阻率为 0.2Ω·cm 的 n 型硅片，各需要掺入何种类型杂质，其密度应是多少？

**解：**利用教材中的电阻率和杂质密度的关系曲线，可以查出 0.2Ω·cm 的 p 型硅中的受主密度

$$N_a = 2.0 \times 10^{17} (\text{cm}^{-3})$$

（1）查出 0.1Ω·cm 的 p 型硅中的受主密度

$$N'_a = 4.7 \times 10^{17} (\text{cm}^{-3})$$

显然应掺入受主杂质，其密度为

$$N'_a - N_a = 2.7 \times 10^{17} (\text{cm}^{-3})$$

（2）查出 0.2Ω·cm 的 n 型硅中的有效施主密度

$$N_d - N_a = 3.3 \times 10^{16} (\text{cm}^{-3})$$

可见应掺入施主杂质，其密度为

$$N_d = N_a + 3.3 \times 10^{16} = 2.33 \times 10^{17} (\text{cm}^{-3})$$

其中 $2.0 \times 10^{17}/\text{cm}^3$ 的施主杂质把受主完全补偿，$3.3 \times 10^{16} \text{cm}^{-3}$ 的施主杂质向导带提供自由载流子，起导电作用。

应该指出，已知样品的电阻率，计算载流子密度或杂质密度时，一般不能引用书中列出的纯材料的迁移率数据[对于硅，$\mu_n = 1350\text{cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$，$\mu_p = 480\text{cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$]，只有电阻率较高时才可以引用。例如在本题中，用公式 $N_a = \frac{1}{\rho e \mu_p}$ 计算 0.2Ω·cm 的 p 型硅片中的受主密度，如果引用 $\mu_p = 480\text{cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$，将得出 $N_a = 0.65 \times 10^{17}/\text{cm}^3$，带来的偏差是很大的。

**【例 4-7】** 在一块掺硼的非简并 p 型硅样品中含有一定浓度的铟，在室温（300K）下测得电阻率为 $\rho = 2.84\Omega\cdot\text{cm}$。已知所掺的硼浓度为 $N_{a1} = 10^{16}/\text{cm}^3$，硼的电离能为 $E_{a1} - E_v = 0.045\text{eV}$，铟的电离能为 $E_{a2} - E_v = 0.16\text{eV}$，试求样品中铟的浓度 $N_{a2}$[室温下为 $N_v = 1.04 \times 10^{19}/\text{cm}^3$，$\mu_p = 200\text{cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$]。

**解：**在室温下，硼（浅能级杂质）已经完全电离，而且 $N_{a1} \gg n_i$，所以只需考虑杂质电离，或者说只计算空穴对电导的贡献就可以了。利用 $1/\rho = pe\mu_p$，可得出

$$p=\frac{1}{\rho e\mu_{\mathrm{p}}}-\frac{1}{2.84\times1.6\times10^{-19}\times200}$$
$$=1.10\times10^{16}(1/\mathrm{cm}^3)$$

在非简并情况下

$$p=N_{\mathrm{v}}\exp\left(-\frac{E_{\mathrm{f}}-E_{\mathrm{v}}}{kT}\right)$$

所以

$$E_{\mathrm{f}}-E_{\mathrm{v}}=kT\ln\frac{N_{\mathrm{v}}}{p}=0.026\ln\frac{1.04\times10^{19}}{1.10\times10^{16}}$$
$$=0.18(\mathrm{eV})$$

由费米能级的位置可知，铟是部分电离的。电离的铟浓度 $N_{\mathrm{a2}}^-$ 为

$$N_{\mathrm{a2}}^-=\frac{N_{\mathrm{a2}}}{1+4\exp\left(\frac{E_{\mathrm{a2}}-E_{\mathrm{f}}}{kT}\right)}$$

式中，因子 4 是受主能级的自旋简并度。

只考虑杂质电离时，电中性条件为

$$p=N_{\mathrm{a1}}+N_{\mathrm{a2}}^-=N_{\mathrm{a1}}+\frac{N_{\mathrm{a2}}}{1+4\exp\left(\frac{E_{\mathrm{a2}}-E_{\mathrm{f}}}{kT}\right)}$$

上式可以改写为

$$p=N_{\mathrm{a1}}+\frac{N_{\mathrm{a2}}}{1+\frac{4p}{N_{\mathrm{v}}}\exp\left(\frac{E_{\mathrm{a2}}-E_{\mathrm{v}}}{kT}\right)}$$

所以

$$N_{\mathrm{a2}}=(p-N_{\mathrm{a1}})\cdot\left[1+\frac{4p}{N_{\mathrm{v}}}\exp\left(\frac{E_{\mathrm{a2}}-E_{\mathrm{v}}}{kT}\right)\right]$$

代入有关的数值，可求出

$$N_{\mathrm{a2}}=2.99\times10^{15}(\mathrm{cm}^{-3})$$

**【例 4-8】** 一个 n 型半导体，设 $\tau=\tau(E)$，电子的能量

$$E(\boldsymbol{k})=E_{\mathrm{c}}+\frac{\hbar^2k^2}{2m_{\mathrm{n}}} \tag{1}$$

(1) 外加电场 $\boldsymbol{\mathscr{E}}=\mathscr{E}\boldsymbol{i}$，试证明电流密度

$$j_x=\frac{e^2\mathscr{E}}{6\pi^3m_{\mathrm{n}}kT}\int\tau(E-E_{\mathrm{c}})f_0(1-f_0)\mathrm{d}\boldsymbol{k}$$

(2). 对于电离杂质散射，$\tau_{\mathrm{I}}=Bv^3$（$B$ 为常数），试证明在非简并情况下，迁移率

$$\mu_{\mathrm{I}}=\frac{8\pi eB}{m_{\mathrm{n}}}\left(\frac{2kT}{\pi m_{\mathrm{n}}}\right)^{3/2}$$

**解：**(1) 只有外加电场时，玻尔兹曼方程可简化为

$$\nabla_kf\cdot\frac{e}{\hbar}\mathscr{E}=\frac{f-f_0}{\tau}$$

假设分布函数的扰动很小，在上式左端的 $f$ 可以用 $f_0$ 代替，并利用 $v_x=\frac{1}{\hbar}\frac{\partial E}{\partial k_x}$，则有

$$f = f_c + e\tau \mathscr{E} v_x \frac{\partial f_0}{\partial E}$$

电流密度

$$\boldsymbol{j} = -\frac{e}{4\pi^3}\int \boldsymbol{v} f \mathrm{d}\boldsymbol{k} = -\frac{e^2 \mathscr{E}}{4\pi^3}\int \tau \frac{\partial f_0}{\partial E} v_x \boldsymbol{v} \mathrm{d}\boldsymbol{k}$$

式(1)表明等能面是球形的，所以 $\tau$ 和$\dfrac{\partial f_0}{\partial E}$关于$\boldsymbol{k}$ 是球对称的，而 $v_y$ 和 $v_z$ 分别是关于 $k_y$ 和 $k_z$ 的奇函数，由此得出

$$j_y = j_z = 0$$

$$\begin{aligned} j_x &= -\frac{e^2 \mathscr{E}}{4\pi^3}\int \tau v_x^2 \frac{\partial f_0}{\partial E} \mathrm{d}\boldsymbol{k} \\ &= \frac{e^2 \mathscr{E}}{4\pi^3 kT}\int \tau v_x^2 f_0 (1 - f_0) \mathrm{d}\boldsymbol{k} \end{aligned} \tag{2}$$

由于 $\tau f_0(1-f_0)$是具有球对称性的函数，而且

$$v_x^2 + v_y^2 + v_z^2 = v^2$$

所以，式(2)可写成

$$\begin{aligned} j_x &= \frac{e^2 \mathscr{E}}{4\pi^3 kT} \cdot \frac{1}{3}\int \tau v^2 f_0 (1 - f_0) \mathrm{d}\boldsymbol{k} \\ &= \frac{e^2 \mathscr{E}}{6\pi^3 m_n kT}\int \tau (E - E_c) f_0 (1 - f_0) \mathrm{d}\boldsymbol{k} \end{aligned} \tag{3}$$

(2) 在非简并情况下，$1-f_0\approx1$，利用导带电子密度

$$n = \frac{1}{4\pi^3}\int f_0 \mathrm{d}\boldsymbol{k}$$

把式(3)改写为

$$j_x = \frac{2ne^2 \mathscr{E}}{3m_n kT} \cdot \frac{\int \tau (E - E_c) f_0 \mathrm{d}\boldsymbol{k}}{\int f_0 \mathrm{d}\boldsymbol{k}}$$

令 $j_x = ne\mu\mathscr{E}$，则

$$\mu = \frac{2e}{3m_n kT} \cdot \frac{\int \tau (E - E_c) f_0 \mathrm{d}\boldsymbol{k}}{\int f_0 \mathrm{d}\boldsymbol{k}} \tag{4}$$

利用

$$\tau = Bv^3 = B\left(\frac{2}{m_n}\right)^{3/2} (E - E_c)^{3/2}$$

$$f_0 \sim \mathrm{e}^{-E/kT}$$

则

$$I = \frac{\int \tau (E - E_c) f_0 \mathrm{d}\boldsymbol{k}}{\int f_0 \mathrm{d}\boldsymbol{k}}$$

$$= B\left(\frac{2}{m_n}\right)^{(b/2)} \frac{\int (E-E_c)^{5/2} e^{-E/kT} k^2 dk}{\int e^{-E/kT} k^2 dk}$$

由式(1)得出

$$k^2 dk \sim (E-E_c)^{1/2} dE \tag{5}$$

所以
$$I = B\left(\frac{2}{m_n}\right)^{3/2} \cdot \frac{\int (E-E_c)^3 e^{-E/kT} dE}{\int (E-E_c)^{1/2} e^{-E/kT} dE}$$

$$= B\left(\frac{2}{m_n}\right)^{3/2} (kT)^{5/2} \frac{\Gamma(4)}{\Gamma(3/2)}$$

$$= 12\pi B\left(\frac{2kT}{\pi m_n}\right)^{3/2} kT$$

把这个结果代入式(5)，则得

$$\mu_1 = \frac{8\pi e B}{m_n}\left(\frac{2kT}{\pi m_n}\right)^{3/2}$$

**【例 4-9】** 假定非简并半导体具有球形等能面，对于晶格散射

$$\tau(E) = \left(\frac{m_n^* q}{2}\right)^{1/2} l_n E^{-\frac{1}{2}}$$

式中，$l_n$ 为电子平均自由程，仅是温度的函数，试证明

$$\mu_n = \frac{4}{3} \frac{q l_n}{\sqrt{2\pi m_n^* k_0 T}}$$

**证明：** 对于具有球形等能面的半导体，在非简并的情况下，电子碰撞的平均自由时间 $\langle\tau\rangle$ 为能量 $E$ 的函数，即

$$\langle\tau\rangle = \frac{\int_0^\infty \tau(E) E^{3/2} e^{-E/k_0 T} dE}{\int_0^\infty E^{3/2} e^{-E/k_0 T} dE}$$

由于 $\mu_n = \frac{q\langle\tau\rangle}{m_n^*}$，按题意

$$\langle\tau\rangle = \frac{\int_0^\infty \tau(E) e^{-E/k_0 T} E^{3/2} dE}{\int_0^\infty E^{3/2} e^{-E/k_0 T} dE} = \left(\frac{m_n^*}{2}\right)^{\frac{1}{2}} l_n E^{-\frac{1}{2}}$$

$$= \left(\frac{m_n^*}{2}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot l_n \cdot \frac{\int_0^\infty E e^{-E/k_0 T} dE}{\int_0^\infty E^{3/2} e^{-E/k_0 T} dE}$$

上式中 $\int_0^\infty E e^{-E/k_0 T} dE$ 为伽玛函数，故

$$\langle\tau\rangle=\left(\frac{m_n^*}{2k_0T}\right)^{\frac{1}{2}}\cdot l_n\cdot\frac{\Gamma(2)}{\Gamma\left(\frac{5}{2}\right)}=\frac{4}{3}l_n\left(\frac{m_n^*}{2\pi k_0T}\right)^{1/2}$$

则

$$\mu_n=\frac{4ql}{3\sqrt{2\pi m_n^*k_0T}}$$

**【例 4-10】** 已知本征锗的电导率在 310K 时为 $3.56\times10^{-2}$S/cm，在 273K 时为 $0.42\times10^{-2}$S/cm。一个 n 型锗样品，在这两个温度时，其施主杂质浓度 $N_D=10^{15}\text{cm}^{-3}$。试计算在上述温度时掺杂锗的电导率。[设 $\mu_n=3600$cm/(V·s)，$\mu_p=1700$cm/(V·s)]

**解：** 本征材料的电导率为

$$\sigma_i=n_iq(\mu_n+\mu_p)$$

所以

$$n_i=\frac{\sigma_i}{q(\mu_n+\mu_p)}$$

当 $T=310$K 时，有

$$\sigma_i=3.56\times10^{-2}(\text{S/cm})$$

$$n_i=\frac{3.56\times10^{-2}}{1.6\times10^{-19}\times(3600+1700)}=42\times10^{12}(1/\text{cm}^3)$$

当 $T=273$K 时，有

$$\sigma_i=0.42\times10^{-2}(\text{S/cm})$$

$$n_i=\frac{0.42\times10^{-2}}{1.6\times10^{-19}\times(3600+1700)}=4.7\times10^{12}(1/\text{cm}^3)$$

已知：$N_D=10^{15}\text{cm}^{-3}$；则杂质全部电离后，$n_0=10^{15}\text{cm}^{-3}$（略去 $n_i$ 影响）；且由 $n_0p_0=n_i^2$ 可求得：$p_0=\frac{n_i^2}{n_0}$。

当 $T=310$K 时，有

$$p_0=\frac{(42\times10^{12})^2}{10^{15}}=1.76\times10^{12}(1/\text{cm}^3)$$

所以

$$\begin{aligned}\sigma&=n_0q\mu_n+p_0q\mu_p\\&=1.6\times10^{-19}\times(10^{15}\times3600+1.76\times10^{12}\times1700)\\&=5.76\times10^{-1}(\text{S/cm})\end{aligned}$$

当 $T=273$K 时，有

$$p_0=\frac{(4.7\times10^{12})^2}{10^{15}}=2.2\times10^{10}(1/\text{cm}^3)$$

所以

$$\begin{aligned}\sigma&=n_0q\mu_n+p_0q\mu_p\\&=1.6\times10^{-19}\times(10^{15}\times3600+2.2\times10^{10}\times1700)\\&=5.76\times10^{-1}(\text{S/cm})\end{aligned}$$

**【例 4-11】** 用本征硅材料制成的一个热敏电阻，在 290K 时的电阻值是 500Ω。设硅

的禁带宽度 $E_q=1.12\text{eV}$，且认为不随温度变化，若假设载流子迁移率不变，试估计在325K时热敏电阻的近似值。

**解：**因为本征材料的电导率 $\sigma_i=n_iq(\mu_n+\mu_p)$，式中 $n_i$ 是本征浓度，$\mu_n$、$\mu_p$ 分别为电子和空穴的迁移率，若迁移率保持恒定不变，那么 $n_i$ 是唯一随温度 $T$ 变化的项。

$$n_i=(N_cN_v)^{\frac{1}{2}}e^{-\frac{E_q}{2k_0T}}=NT^{3/2}e^{-\frac{E_q}{2k_0T}}$$

式中，$N$ 是某个常数。

所以电阻 $R$ 按 $n_i^{-1}$ 的规律变化，即 $R=CT^{-3/2}e^{\frac{E_q}{2k_0T}}C$ 为另一个常数。

故
$$\frac{R_1}{R_2}=\left(\frac{T_2}{T_1}\right)^{\frac{3}{2}}\exp\left[\frac{E_q}{2k_0}\left(\frac{1}{T_1}-\frac{1}{T_2}\right)\right]$$

在 $T=290\text{K}$ 时，$R_1=500\Omega$，故有

$$500=C(290)^{-3/2}\exp\left(\frac{1.12\times1.6\times10^{-19}}{2\times1.38\times10^{-23}\times290}\right)$$
$$=C(290)^{-3/2}\exp22.3$$

在 $T=325\text{K}$ 时，　$R_2=C(325)^{-3/2}e^{19.9}$，所以

$$\frac{R_2}{500}=\left(\frac{290}{325}\right)^{-3/2}e^{(19.9-22.3)}=0.076$$

故
$$R_2\approx38.1(\Omega)$$

【例 4-12】　已知本征锗材料的电阻率随温度 $T$ 的变化可列表如下：

| $T$(K) | 385 | 458 | 556 | 714 |
|---|---|---|---|---|
| $\rho(\Omega\cdot\text{cm})$ | 0.028 | 0.0061 | 0.0013 | 0.00027 |

假设 $E_g$ 与温度 $T$ 无关，电子和空穴的迁移率 $\mu_n$、$\mu_p$ 均按 $T^{-\frac{3}{2}}$ 变化，求锗的禁带宽度 $E_g$。

**解：**本征材料的电导率为 $\sigma_i=n_iq(\mu_n+\mu_p)$，$n_i\propto T^{3/2}e^{-\frac{E_g}{2k_0T}}$，考虑到迁移率 $\mu$ 随温度按 $T^{-\frac{3}{2}}$ 变化，则 $\sigma_i\propto e^{-\frac{E_g}{2k_0T}}$，即 $\rho_i\propto e^{\frac{E_g}{2k_0T}}$ 写成

$$\rho_i=Ce^{\frac{E_g}{2k_0T}}$$

式中，$C$ 为一个常数，取对数后得

$$\ln\rho=\ln C+\frac{E_g}{2k_0T}$$

显然，根据假设可得到 $\ln\rho$ 与 $\frac{1}{T}$ 的关系曲线应该是一条斜率为 $\frac{E_g}{2k_0}$ 的直线。

| $T$(K) | 385 | 458 | 556 | 714 |
|---|---|---|---|---|
| $\frac{1}{T}$(1/K) | $2.6\times10^{-3}$ | $2.18\times10^{-3}$ | $1.80\times10^{-3}$ | $1.40\times10^{-3}$ |
| $\ln\rho$ | −3.58 | −5.10 | −6.65 | −8.21 |

由题中附表(见前页)所给数据可画出一直线,该直线的斜率为 3838,即$\frac{E_g}{2k_0}=3838$。

故
$$E_g=2\times3838\times k_0=2\times3838\times\frac{1.38\times10^{-23}}{1.6\times10^{\ 19}}$$
$$=0.66(\text{eV})$$

**【例 4-13】** 试计算本征硅在室温时的电阻率。设电子和空穴迁移率分别为 $1350\text{cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$和 $500\text{cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$,当掺入百万分之一的砷(As)后,设杂质全部电离,试计算其电导率比本征 Si 的电导率增大多少倍?

**解:** 因为 $\sigma_i=n_iq(\mu_n+\mu_p)$,设 $n_i=1.5\times10^{10}/\text{cm}^3$,代入已知数据后得

$$\sigma_i=1.5\times10^{10}\times1.6\times10^{10}\times(1350+500)$$
$$=4.44\times10^{\ 6}(\text{S/cm})\quad\left(\text{S}=\frac{1}{\Omega}\right)$$

已知硅的原子密度为 $5\times10^{22}/\text{cm}^3$,则掺入 As 的浓度为

$$N_D=5\times10^{22}\times10^{-6}=5\times10^{16}(1/\text{cm}^3)$$

又因为杂质全部电离,所以

$$n_0=N_D=5\times10^{16}(1/\text{cm}^3)$$

当杂质浓度 $N_i=5\times10^{16}/\text{cm}^3$ 时,电子迁移率为

$$\mu_n=850[\text{cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})]$$

忽略少子空穴对导电的贡献,故:

$$\sigma=n_q(\mu_n)=5\times10^{16}\times1.6\times10^{-13}\times850$$
$$=6.8(\text{S/cm})$$

故
$$\sigma/\sigma_i=\frac{6.8}{4.44\times10^{6}}=1.53\times10^{6}$$

即电导率增大了 153 万倍。

**【例 4-14】** 在半导体锗材料中掺入施主杂质浓度 $N_D=10^{14}\text{cm}^{-3}$,受主杂质浓度 $N_A=7\times10^{13}\text{cm}^{-3}$;设室温下本征锗材料的电阻率 $\rho_i=60\Omega\cdot\text{cm}$,假设电子和空穴的迁移率分别为 $\mu_n=3800\text{cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$,$\mu_p=1800\text{cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$,若流过样品的电流密度为 $52.3\text{mA/cm}^2$,求所加的电场强度。

**解:** 须先求出本征载流子浓度 $n_i$,即

$$n_i=\frac{\sigma_i}{q(\mu_n+\mu_p)}$$
$$=\frac{1}{60\times1.6\times10^{-19}\times(3800+1800)}$$
$$=1.86\times10^{13}(1/\text{cm}^3)$$

又因为
$$p_0+N_D^+=n_0+N_A$$
$$n_0p_0=n_i^2$$

联立求解得
$$n_0^2+(N_A-N_D)n_0-n_i^2=0$$

故
$$n_0=-\frac{(N_A-N_D)}{2}+\frac{\sqrt{(N_A-N_D)^2+4n_i^2}}{2}$$
$$=\frac{3\times10^{10}}{2}+\frac{4.78\times10^{13}}{2}=3.89\times10^{13}(1/\text{cm}^3)$$
$$p_0=\frac{n_i^2}{n_0}=\frac{(1.86\times10^{13})^2}{3.89\times10^{10}}=8.89\times10^{12}(1/\text{cm}^3)$$
所以样品的电导率为
$$\sigma=q(n_0\mu_n+p_0\mu_p)$$
$$=1.6\times10^{-19}\times(3.89\times10^{13}\times3800+8.89\times10^{12}\times1800)$$
$$=2.62\times10^{-2}(\text{S/cm})$$
所以电场强度
$$E=\frac{J}{\sigma}=\frac{52.3\text{mA/cm}^2}{2.62\times10^{-2}/\Omega\cdot\text{cm}}$$
$$=1.996\times10^3(\text{mA}\cdot\Omega/\text{cm})$$
即 $E=1.996\text{V/cm}$。

**【例 4-15】** 假设某晶体中导电电子的能量色散关系可写成
$$E(k_x,k_y,k_z)=\frac{\hbar^2}{Z}\left(\frac{k_x^2}{m_x}+\frac{k_y^2}{m_y}+\frac{k_z^2}{m_z}\right)$$
试在弛豫时间近似下(假定弛豫时间 $\tau$ 仅是能量 $E$ 的函数),导出晶体的电导率。

**解:** 当晶体中没有温度梯度,而只有外加电场 $\mathscr{E}$ 时,电子的分布函数由下式给出
$$f(\boldsymbol{k})=f_0(E)+e\tau(\mathscr{E}\cdot\boldsymbol{v})\frac{\partial f_0}{\partial E}\tag{1}$$
假设在 $\boldsymbol{k}$ 空间的体积元 $\mathrm{d}\tau_k$ 内有 $\mathrm{d}n$ 个电子,由第 5 章讨论知道,在单位 $\boldsymbol{k}$ 空间体积中,可以有 $2V/(2\pi)^3$ 个状态数($V$ 是晶体的体积),所以在 $\mathrm{d}\tau_k$ 内可以有 $\frac{2V}{(2\pi)^3}\mathrm{d}\tau_k$ 个状态数。而这些状态中电子的占据概率由 $f(\boldsymbol{k})$给出,所以 $\mathrm{d}\tau_k$ 中的电子密度为
$$\mathrm{d}n=\frac{1}{V}\frac{2V}{(2\pi)^3}f(\boldsymbol{k})\mathrm{d}\tau_k=\frac{2}{(2\pi)^3}f(\boldsymbol{k})\mathrm{d}\tau_k\tag{2}$$
如果这些电子具有速度 $\boldsymbol{v}$,则由这些电子引起的电流密度为
$$\mathrm{d}\boldsymbol{j}=-e\boldsymbol{v}\mathrm{d}n$$
因此总的电流密度为
$$\boldsymbol{j}=\int\mathrm{d}\boldsymbol{j}=-\int e\boldsymbol{v}\mathrm{d}n=\frac{2}{(2\pi)^3}\int_{BZ}-e\boldsymbol{v}f(\boldsymbol{k})\mathrm{d}\tau_k\tag{3}$$
把式(1)代入式(3),得
$$\boldsymbol{j}=\frac{}{2(2\pi)^3}\int_{BZ}-e\boldsymbol{v}f_0(E)\mathrm{d}\tau_k+$$
$$\frac{2e^2}{(2\pi)^3}\int_{BZ}\tau(E)\left[-\frac{\partial f_0}{\partial E}\right]\boldsymbol{v}(\boldsymbol{v}\cdot\mathscr{E})\mathrm{d}\tau_k\tag{4}$$
式(4)中第一项表示热平衡情况下的电流密度,显然它应该等于零。由式(4)可以写

出 $j$ 在 $\alpha$ 方向上的分量

$$j_\alpha = \sum_{\beta=1}^{3}\left[\frac{e^2}{4\pi^3}\int_{BZ}\tau(E)\left[-\frac{\partial f_0}{\partial E}\right]v_\alpha v_\beta \mathrm{d}\tau_{\boldsymbol{k}}\right]\mathscr{E}_\beta \tag{5}$$

已知导电电子的能量色散关系可表示成

$$E(k_x,k_y,k_z) = \frac{\hbar^2}{Z}\left(\frac{k_x^2}{m_x}+\frac{k_y^2}{m_y}+\frac{k_z^2}{m_z}\right) \tag{6}$$

因此可以求出导电电子的平均速度 $\boldsymbol{v}$ 在 $\alpha$ 方向上的分量

$$v_\alpha = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial E}{\partial k_\alpha} = \frac{\hbar k_\alpha}{m_\alpha} \tag{7}$$

所以式(5)可表示成

$$j_\alpha = \sum_{\beta=1}^{3}\left[\frac{e^2\hbar^2}{4\pi^3 m_\alpha m_\beta}\int_{BZ}\tau(E)\left[-\frac{\partial f_0}{\partial E}\right]k_\alpha k_\beta \mathrm{d}\tau_{\boldsymbol{k}}\right]\mathscr{E}_\beta \tag{8}$$

为了计算上面的积分,做如下的变量变换

$$k_\alpha = \sqrt{m_\alpha}q_\alpha \tag{9}$$

因此,式(6)可写成

$$E(q) = \frac{\hbar^2}{Z}(q_x^2+q_y^2+q_z^2) = \frac{\hbar^2}{Z}q^2 \tag{10}$$

在 $\boldsymbol{k}$ 空间中的体积元 $\mathrm{d}\tau_{\boldsymbol{k}}$ 可表示成

$$\begin{aligned}\mathrm{d}\tau_{\boldsymbol{k}} &= \mathrm{d}k_x\mathrm{d}k_y\mathrm{d}k_z = \sqrt{m_x m_y m_z}\ \mathrm{d}q_x\mathrm{d}q_y\mathrm{d}q_z \\ &= \sqrt{m_x m_y m_z}\ \mathrm{d}\tau_{\mathrm{q}}\end{aligned} \tag{11}$$

因此,式(8)可写成

$$\begin{aligned}j_\alpha &= \sum_{\beta=1}^{3}\left[\frac{e^2\hbar 2\ \sqrt{m_x m_y m_z}}{4\pi^3\ \sqrt{m_\alpha m_\beta}}\int_{BZ}\tau(E\left[-\frac{\partial f_0}{\partial E}\right]q_\alpha q_\beta \mathrm{d}\tau_{\mathrm{q}}\right]\mathscr{E}_\beta \\ &= \sum_{\beta=1}^{3}\sigma_{\alpha\beta}\mathscr{E}_\beta\end{aligned} \tag{12}$$

所以,电导率 $\sigma_{\alpha\beta}$ 可表示成

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{e^2\hbar 2\ \sqrt{m_x m_y m_z}}{3\pi^3\ \sqrt{m_\alpha m_\beta}}\int_{BZ}\tau(E)\left[-\frac{\partial f_0}{\partial E}\right]q_\alpha q_\beta \mathrm{d}\tau_q \tag{13}$$

为了计算积分

$$I_{\alpha\beta} = \int_{BZ}\tau(E)\left[-\frac{\partial f_0}{\partial E}\right]q_\alpha q_\beta \mathrm{d}\tau_q$$

我们引进球面极坐标,因此

$$\begin{aligned}I_{xy} = I_{yx} &= \int\tau(E)\left[-\frac{\partial f_0}{\partial E}\right]q^2\sin^2\theta\ \cos\varphi\ \sin\varphi\, q^2\ \sin\theta\mathrm{d}q\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi \\ &= \int\tau(E)\left[-\frac{\partial f_0}{\partial E}\right]q^4\mathrm{d}q\int_0^\pi\sin^3\theta\mathrm{d}\theta\int_0^{2\pi}\cos\varphi\ \sin\varphi\mathrm{d}\varphi \\ &= 0\end{aligned}$$

$$I_{xz}=I_{zx}=\int\tau(E)\left[-\frac{\partial f_0}{\partial E}\right]q^4\mathrm{d}q\int_0^{\pi}\sin^2\theta\cos\theta\mathrm{d}\theta\int_0^{2\pi}\cos\varphi\mathrm{d}\varphi$$
$$=0$$
$$I_{yz}=I_{zy}=\int\tau(E)\left[-\frac{\partial f_0}{\partial E}\right]q^4\mathrm{d}q\int_0^{\pi}\sin^2\theta\cos\theta\mathrm{d}\theta\int_0^{2\pi}\sin\varphi\mathrm{d}\varphi$$
$$=0$$
$$I_{xx}=I_{yy}=I_{zz}=\int\tau(E)\left[-\frac{\partial f_0}{\partial E}\right]q^4\mathrm{d}q\int_0^{\pi}\cos^2\theta\sin\theta\mathrm{d}\theta\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi$$
$$=\frac{4\pi}{3}\int\tau(E)\left[-\frac{\partial f_0}{\partial E}\right]q^4\mathrm{d}q$$

根据式(10)

$$q^4\mathrm{d}q=\frac{2\sqrt{2}E^{3/2}}{\hbar^5}\mathrm{d}E$$

所以

$$I_{xx}=I_{yy}=I_{zz}=\frac{4\pi}{3}\int\tau(E)\left[-\frac{\partial f_0}{\partial E}\right]\frac{2\sqrt{2}}{\hbar^5}E^{3/2}\mathrm{d}E$$
$$\approx\frac{8\sqrt{2}\pi}{3\hbar^5}E_{\mathrm{F}}^{3/2}\tau(E_{\mathrm{F}})$$

在 $T=0\mathrm{K}$ 附近,$\frac{\partial f(E)}{\partial E}$具有$\delta(E-E_{\mathrm{F}})$的性质,在 $k_0T\ll E_{\mathrm{F}}$ 情况下,上式利用关于任意函数 $g(E)$的积分可近似展开成

$$I=-\int_0^{\infty}g(E)\frac{\partial f(E)}{\partial E}\mathrm{d}E\approx g(E_{\mathrm{F}})+\frac{\pi^2}{6}(k_0T)^2g''(E)+\cdots$$

且只取第一项。这样

$$I_{\alpha}=\frac{8\sqrt{2}\pi}{3\hbar^5}E_{\mathrm{F}}^{3/2}\tau(E_{\mathrm{F}})\delta_{\alpha\beta}\tag{14}$$

因此,式(13)可写成

$$\sigma_{\alpha\beta}=\frac{2\sqrt{2}e^2}{3\hbar^3\pi^2}\sqrt{\frac{m_xm_ym_z}{m_{\alpha}m_{\beta}}}E_{\mathrm{F}}^{3/2}\tau(E_{\mathrm{F}})\delta_{\alpha\beta}\tag{15}$$

总的电子密度 $n$ 可根据式(2)求出。因为在加电场前后,金属中的电子密度 $n$ 是不会发生变化的,所以式中 $f(\boldsymbol{k})$可用热平衡时的费米分布 $f_0(E)$来代替。另外,因为费米能级随温度变化很小,因此式(15)中的 $E_{\mathrm{F}}$ 可近似地看成是热力学零度时的费米能级。而在热力学零度下,有

$$f_0(E)=\begin{cases}1 & E\leqslant E_{\mathrm{F}}\\0 & E>E_{\mathrm{F}}\end{cases}$$

所以电子密度 $n$ 可表示成

$$n=\int\mathrm{d}n=\frac{2}{(2\pi)^3}\int\mathrm{d}\tau_{\boldsymbol{k}}=\frac{\sqrt{m_xm_ym_z}}{4\pi^3}\int_{\frac{\hbar^2q^2}{2}=E_{\mathrm{F}}}\mathrm{d}\tau_{\mathrm{q}}$$

$$= \frac{\sqrt{m_x m_y m_z}}{4\pi^3}\frac{4\pi}{3}q_F^3 = \frac{\sqrt{m_x m_y m_z}}{4\pi^2}\frac{2\sqrt{2}}{\hbar^3}E_F^{3/2} \tag{16}$$

把式(16)代入式(15)，则可得

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{ne^2\tau(E_F)}{\sqrt{m_\alpha m_\beta}}\delta_{\alpha\beta} \tag{17}$$

电导率可表示成下面的张量形式

$$\boldsymbol{\sigma} = \begin{bmatrix} \frac{n\,e^2\tau(E_F)}{m_x} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{n\,e^2\tau(E_F)}{m_y} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{n\,e^2\tau(E_F)}{m_z} \end{bmatrix} \tag{18}$$

**【例 4-16】** 在某些半导体器件的局域范围内存在着极强的电场，使电子温度 $T_e$ 与晶格温度 $T_L$ 不相等(磁场效应)。设 $\mu_n$、$\tau_e$ 分别为电子迁移率和能量弛豫时间。

(1) 试证：$T_e = T_L + \left(\frac{2g\tau_e\mu_n}{3k_0}\right)\mathscr{E}^2$($\mathscr{E}$ 为电场强度)；

(2) 设 $\tau_e = 10^{-11}\text{s}$，$\mu_n = 10^3\text{cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$，$\mathscr{E} = 10^3\text{V/cm}$；试求电子温度 $T_e$ 与晶格温度 $T_L$ 之差 $\Delta T$。

**解**：(1) 在强电场作用下，电子在两次连续碰撞之间被电场加速的同时获得可观的能量，然而在碰撞时又把能量传递给晶格。能量 $E$ 随时间的变化率可写为

$$\frac{dE}{dA} = \left(\frac{dE}{dA}\right)_c + \left(\frac{dE}{A}\right)_L = (-q\mathscr{E}V_d) + \frac{E(T_e) - E(T_L)}{\tau_e} \tag{1}$$

式中，$V_D = \mu_n\mathscr{E}$ 为电子漂移速度，$\tau_e$ 为能量弛豫时间，稳态下，$\frac{dE}{dt} = 0$；依据能量均分原理得知

$$E(T_e) = \frac{3}{2}k_0 T_e,\quad E(T_L) = \frac{3}{2}k_0 T_L$$

代入式(1)得

$$-q\mu_n\mathscr{E}^2 + \frac{3}{2}k_0(T_e - T_L)\tau_e = 0$$

$$T_e = T_L + \left(\frac{3q\tau_e\mu_n}{3k_0}\right)\mathscr{E}^2 \tag{2}$$

即证毕。

(2) 将题中给定的条件代入式(2)，得

$$\Delta T = T_e - T_L = \frac{2\times 1.6\times 10^{-19}\times 10^{-11}\times 10^3\times (10^3)^2}{3\times 1.38\times 10^{-23}} = 77.3(\text{K})$$

即在此强电场中，电子温度比晶格温度高出 77.3K。

**【例 4-17】** 试证 Ge 的电导有效质量为：

$$\frac{1}{m_c} = \frac{1}{3}\left(\frac{2}{m_t} + \frac{1}{m_l}\right)$$

**证明一**:设晶体立方轴为 $x,y,z$;$\boldsymbol{k}$ 空间坐标轴为 $k_1,k_2,k_3$,且 $k_3$ 轴沿能量椭球的主轴方向。如图 4-6 所示。对 Ge,$k_3$ 轴沿[111]方向;为计算方便,令 $\boldsymbol{u}$ 为电场 $\mathscr{E}$ 的单位矢量。

$\boldsymbol{a},\boldsymbol{b},\boldsymbol{c}$ 为 $k_1,k_2,k_3$ 方向的单位矢量,如图 4-7 所示。

设 $\boldsymbol{u}$ 对 $x,y,z$ 轴三个方向上投影为 $u_1,u_2,u_3$;$\boldsymbol{u}$ 对 $k_1,k_2,k_3$ 三个方向的分量分别为 $u'_1,u'_2,u'_3$;将电场 $\mathscr{E}$ 投影到 $k_1,k_2,k_3$ 三个方向,则其分量为:

$$\mathscr{E}u'_1=\mathscr{E}\sin\theta\cos\varphi$$

$$\mathscr{E}u'_2=\mathscr{E}\sin\theta\sin\varphi$$

$$\mathscr{E}u'_3=\mathscr{E}\cos\theta$$

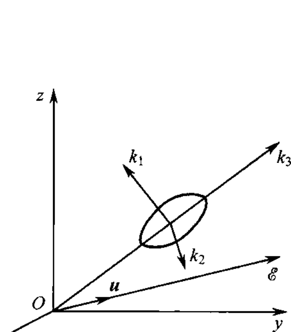



图 4 6　例 4-17 图

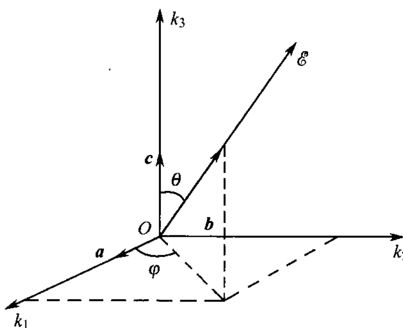



图 4-7　单位矢量图

在这三个电场分量作用下,$k_1$、$k_2$、$k_3$ 轴方向上的电流密度分别为

$$J_a=n'\frac{q^2\tau}{m_1}\varepsilon'_{n_1}=n'\frac{q^2\tau}{m_1}\mathscr{E}\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{u}$$

同理

$$J_b=n'\frac{q^2\tau}{m_2}\mathscr{E}\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{u}$$

$$J_c=n'\frac{q^2\tau}{m_3}\mathscr{E}\boldsymbol{c}\cdot\boldsymbol{u}$$

式中,$n'$为单位体积中电子均分到 4 个能量椭球内的电子数,即

$$4n'=n_0$$

所以总的电流密度为

$$J=J_a+J_b+J_c$$

$$=n'q^2\tau\mathscr{E}\left[\frac{\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{u}}{m_1}\boldsymbol{a}+\frac{\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{u}}{m_2}\boldsymbol{b}+\frac{\boldsymbol{c}\cdot\boldsymbol{u}}{m_3}\boldsymbol{c}\right]$$

$J$ 沿电场 $\mathscr{E}$(即 $\boldsymbol{u}$ 方向上)分量

$$J_u=\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{u}=n'q^2\tau\mathscr{E}\left[\frac{(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{u})^2}{m_1}+\frac{(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{u})^2}{m_2}+\frac{(\boldsymbol{c}\cdot\boldsymbol{u})^2}{m_3}\right]$$

Ge 极值附近等能面为一旋转椭球,其长轴沿[111]方向。所以

$$m_1=m_2=m_t\qquad m_3=m_l$$

又 $\quad \boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{u}=\sin\theta\cos\varphi \qquad \boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{u}=\sin\theta\sin\varphi$

$\boldsymbol{c}\cdot\boldsymbol{u}=\cos\theta$

故

$$J_u=\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{u}=n'q^2\tau\mathscr{E}\left(\frac{\sin^2\theta\cos^2\varphi}{m_t}+\frac{\sin^2\theta\sin^2\varphi}{m_t}+\frac{\cos^2\theta}{m_t}\right)$$

$$=n'q^2\tau\mathscr{E}\left(\frac{1-\cos^2\theta}{m_t}+\frac{\cos^2\theta}{m_t}\right)$$

$$=n'q^2\tau\mathscr{E}\left[\frac{1}{m_t}+\left(\frac{1}{m_l}-\frac{1}{m_t}\right)(\boldsymbol{c}\cdot\boldsymbol{u})^2\right]$$

因为 Ge 的能量椭球共有 8 个半椭球，合计为 4 个整椭球。所以，电流密度 $J_u$ 实际上应该对上式求和，即

$$J_u=n'q^2\tau\mathscr{E}\sum_{1,2,3,4}\left[\frac{1}{m_t}+\left(\frac{1}{m_l}-\frac{1}{m_t}\right)(\boldsymbol{c}\cdot\boldsymbol{u})^2\right]$$

显然要解出 $J_u$ 主要是求出长轴与电场 $\mathscr{E}$ 的夹角余弦；这 8 个椭球主轴 $\boldsymbol{c}$ 相对 $x$、$y$、$z$ 轴的方向余弦为

$$\boldsymbol{c}_1=\frac{1}{\sqrt{3}(\bar{1}\,\bar{1}\,\bar{1})},\frac{1}{\sqrt{3}}(\bar{1}\,\bar{1}\,\bar{1})$$

故

$$(\boldsymbol{c}_1\cdot\boldsymbol{u})^2=\frac{1}{3}(u_1+u_2+u_3)^2,\text{或}\frac{1}{3}(-u_1-u_2-u_3)^2$$

$$\boldsymbol{c}_1:\frac{1}{\sqrt{3}}(\bar{1}\,\bar{1}1),\frac{1}{\sqrt{3}}(11\bar{1})$$

故

$$(\boldsymbol{c}_2\cdot\boldsymbol{u})^2=\frac{1}{3}(-u_1-u_2+u_3)^2,\text{或}\frac{1}{3}(u_1+u_2-u_3)^2$$

$$\boldsymbol{c}_2:\frac{1}{\sqrt{3}}(\bar{1}1\bar{1}),\frac{1}{\sqrt{3}}(1\bar{1}1)$$

故

$$(\boldsymbol{c}_3\cdot\boldsymbol{u})^2=\frac{1}{3}(-u_1+u_2-u_3)^2,\text{或}\frac{1}{3}(u_1-u_2+u_3)^2$$

$$\boldsymbol{c}_3:\frac{1}{\sqrt{3}}(1\bar{1}\,\bar{1}),\frac{1}{\sqrt{3}}(\bar{1}11)$$

故

$$(\boldsymbol{c}_4\cdot\boldsymbol{u})^2=\frac{1}{3}(u_1-u_2-u_3)^2,\text{或}\frac{1}{3}(-u_1+u_2+u_3)^2$$

按照二项式展开即得

$$(\boldsymbol{c}_1\cdot\boldsymbol{u})^2=\frac{1}{3}(u_1^2+u_2^2+u_3^2+2u_1u_2+2u_1u_3+2u_2u_3)$$

$$(\boldsymbol{c}_2\cdot\boldsymbol{u})^2=\frac{1}{3}(u_1^2+u_2^2+u_3^3+2u_1u_2-2u_1u_3-2u_2u_3)$$

$$(\boldsymbol{c}_3\cdot\boldsymbol{u})^2=\frac{1}{3}(u_1^2-u_2^2+u_3^2-2u_1u_2+2u_1u_3-2u_2u_3)$$

$$(\boldsymbol{c}_4\cdot\boldsymbol{u})^2=\frac{1}{3}(u_1^2+u_2^2+u_3^2-2u_1u_2-2u_1u_3+2u_2u_3)$$

所以 $$\sum_{i=1,2,3,4}(\boldsymbol{c}_i \cdot \boldsymbol{u})^2 = \frac{4}{3}(u_1^2 + u_2^2 + u_3^2)$$

因为 $\boldsymbol{u}$ 为单位矢量，故 $$u_1^2+u_2^2+u_3^2=1$$

所以 $$\sum_{i=1,2,3,4}(c_i \cdot u)^2 = \frac{4}{3}$$

$$\begin{aligned} J_u &= n'q^2\tau\mathscr{E}\left[\frac{4}{m_t} + \left(\frac{1}{m_l} - \frac{1}{m_t}\right)\frac{4}{3}\right] \\ &= n'q^2\tau\mathscr{E}\left(\frac{8}{3m_t} + \frac{4}{3m_l}\right) \\ &= \frac{4}{3}n'q^2\tau\mathscr{E}\left(\frac{2}{m_t} + \frac{1}{m_l}\right) \end{aligned}$$

已知 $$4n'=n_0$$

所以 $$J_u=\frac{1}{3}n_0q^2\tau\mathscr{E}\left(\frac{2}{m_t}+\frac{1}{m_l}\right)$$

若令 $$\frac{1}{m_c}=\frac{1}{3}\left(\frac{2}{m_t}+\frac{1}{m_l}\right)$$

则 $$J_u=\frac{n_0q^2\tau\mathscr{E}}{m_c}$$

显然，锗的电导有效质量也应为

$$\frac{1}{m_c} = \frac{1}{3}\left(\frac{2}{m_t} + \frac{1}{m_l}\right)$$

证毕。

**注意：**在物理学问题中，常遇到一些与坐标方向有联系的量。例如：一个矢量 $\boldsymbol{E}$ 有三个分量 $E_1$、$E_2$、$E_3$ 与坐标三个方向 $x_1$、$x_2$、$x_3$ 对应。取另一坐标 $x'_1$、$x'_2$、$x'_3$；若 $x'_i=a_{ij}x_j$，则在新坐标中 $\boldsymbol{E}$ 的三个分量 $E'_1$、$E'_2$、$E'_3$ 与 $E_1$，$E_2$，$E_3$ 间的关系为

$$E'_i = a_{ij}E_j$$

当坐标变换时，按上面关系变化的物理量叫做一级张量（即矢量）。

对二级张量，考虑晶体中电流密度 $j$ 与电场强度 $E$ 的关系

$$\begin{aligned} j_1 &= \sigma_{11}E_1 + \sigma_{12}E_2 + \sigma_{13}E_3 \\ j_2 &= \sigma_{21}E_1 + \sigma_{22}E_2 + \sigma_{23}E_3 \\ j_3 &= \sigma_{31}E_1 + \sigma_{32}E_2 + \sigma_{33}E_3 \end{aligned}$$

显然，$j$ 与 $E$ 之间的关系要由 9 个量 $\begin{vmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{vmatrix}$ 决定。

当进行坐标变换 $x'_i=a_{ij}x_j$ 时，在新坐标系中 $j$ 与 $E$ 的关系为

$$\begin{aligned} j'_1 &= \sigma'_{11}E'_1 + \sigma'_{12}E'_2 + \sigma'_{13}E'_3 \\ j'_2 &= \sigma'_{21}E'_1 + \sigma'_{22}E'_2 + \sigma'_{23}E'_3 \\ j'_3 &= \sigma'_{31}E'_1 + \sigma'_{32}E'_2 + \sigma'_{33}E'_3 \end{aligned}$$

可以证明：

$$\sigma'_{ij} = a_{ik}a_{jl}\sigma_{kl}$$

任何一个物理量由 9 个分量组成，其中每一个分量都与两个坐标方向有联系，而当坐标变换时，按上式所表示的关系变换的物理量叫做二级张量。显然电导率 $\sigma_{ij}$ 为一个二级张量。此外，常遇到的二级张量还有有效质量张量、应力张量、应变张量等。

三级张量有 27 个分量，如描述晶体压电效应，即产生的极化强度 $p$ 与应力 $S_{jk}$ 间关系为

$$p_i = d_{ijk}S_{jk}$$

则 $d_{ijk}$ 为三级张量。

有关张量性质和运算法则可参阅有关专著。

若用电导率张量证明此题，可证明如下。

**证明 2：** Ge 的导带极值能谷出现在(111)方向的布里渊区边界上，独立的能谷有 4 个（即 8 个$\frac{1}{2}$合并为 4 个）。若晶体中电子密度为 $n_0$，则每一个能谷中的电子密度为$\frac{n_0}{4}$；因为 4 个能谷相对立方晶体主轴对称，即绕[001]轴每转 90°后，可使它们彼此重合。因此只需把其中一个能谷的电导率张量变换到晶体主轴坐标系来，然后乘以 4 即得 4 个能谷的总贡献。

取(111)方向上的一个能谷，选取依属该能谷的坐标系，主轴方向为($\bar{1}$10)、($\bar{1}\,\bar{1}$2)、(111)。其基矢分别为 $\boldsymbol{i},\boldsymbol{j},\boldsymbol{k}$，它们与立方主轴基矢 $\boldsymbol{i}',\boldsymbol{j}',\boldsymbol{k}'$之间的变换关系为

$$\begin{vmatrix} \boldsymbol{i}' \\ \boldsymbol{j}' \\ \boldsymbol{k}' \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ 0 & \sqrt{\frac{2}{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} \boldsymbol{i} \\ \boldsymbol{j} \\ \boldsymbol{k} \end{vmatrix}$$

由对称变换　　$\sigma_{ij} = 4a_{ik}a_{jl}\sigma_{kl}^{(s)}$（s 指考虑的能谷）

对立方晶系有

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ii}\delta_{ij} = \begin{cases} 0 & i \neq j \\ \sigma_{ii} & i = j \end{cases}$$

即 $\sigma_{ij} = 0(i \neq j)$只有 $\sigma_{11} = \sigma_{22} = \sigma_{33}$，所以

$$\sigma_{ii} = 4a_{ik}^2\sigma_{kk}^{(s)}$$

又因为　　$\sigma_{kk}^{(s)} = \dfrac{4n^s q^2 \tau}{m_k}$，　$4n^{(s)} = n$

故

$$\sigma_{ii} = 4n^s q^2 \tau\left(\frac{1}{2m_t} + \frac{1}{6m_t} + \frac{1}{3m_l}\right)$$

$$4n^s = n_0$$

因为
$$\sigma_{ii}=n_0q^2\tau\cdot\frac{1}{3}\left(\frac{2}{m_t}+\frac{1}{m_l}\right)$$
$$=\frac{n_0q^2\tau}{m_c}$$
即得
$$\frac{1}{m_c}=\frac{1}{3}\left(\frac{2}{m_t}+\frac{1}{m_l}\right)$$
其他方向上能谷依属的坐标系和立方晶体主轴方向间的变换关系分别为
$$\begin{vmatrix}-\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{3}}\\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{3}}\\ 0 & \sqrt{\frac{2}{3}} & \sqrt{\frac{1}{3}}\end{vmatrix},\quad \begin{vmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{3}}\\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{3}}\\ 0 & \sqrt{\frac{2}{3}} & \sqrt{\frac{1}{3}}\end{vmatrix},\quad \begin{vmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{3}}\\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{3}}\\ 0 & \frac{2}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}}\end{vmatrix}$$

**【例 4-18】** 假设半导体晶体受到电场 $\boldsymbol{E}$ 和磁场 $\boldsymbol{B}$ 的作用，且 $\boldsymbol{E}$ 在 $x$-$y$ 平面上，$\boldsymbol{B}$ 沿 $z$ 方向，试在计入磁场对电子的各级作用下，推导半导体电子在电磁场中的分布函数。

**解：** 相空间中，玻尔兹曼方程为
$$v\cdot\nabla_r f+a\cdot\nabla_v f=b-a$$
写成分量形式，则为
$$v_x\frac{\partial f}{\partial x}+v_y\frac{\partial f}{\partial y}+v_z\frac{\partial f}{\partial z}+a_x\frac{\partial f}{\partial v_z}+a_y\frac{\partial f}{\partial v_y}+a_z\frac{\partial f}{\partial v_z}=b-a \tag{1}$$
设电场在 $x$-$y$ 平面上，即 $\boldsymbol{E}=(E_x,E_y,0)$；同理磁场
$$\boldsymbol{B}=(0,0,B_z)$$
根据
$$F=ma=-q(\mathscr{E}+\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B})$$
则有
$$ma_z=-q(\mathscr{E}_z+v_yB_z)$$
$$ma_y=-q(\mathscr{E}_y-v_xB_z)$$
$$ma_z=0$$
从上式求出 $a_x$、$a_y$、$a_z$ 代入式(1)，并注意到电子所受的力方向只在 $x$-$y$ 平面上，$f$ 应与 $z$ 无关，式(1)则变为
$$v_x\frac{\partial f}{\partial x}+v_y\frac{\partial f}{\partial y}-\frac{q}{m}(\mathscr{E}_x+v_yB)\frac{\partial f}{\partial v_z}-\frac{q}{m}(\mathscr{E}_y-v_xB)\frac{\partial f}{\partial v_z}=b-a \tag{2}$$
令
$$f=f_0+v_x\varphi_1+v_y\varphi_2 \tag{3}$$
$\varphi_1$，$\varphi_2$ 应用为$\boldsymbol{\mathscr{E}}$，$B$，$\boldsymbol{v}$ 和 $x$，$y$ 的函数。它在相空间中任一点的值与 $f_0$ 比较均为小量。那么，在弛豫时间近似中有
$$b-a=-\frac{f-f_0}{\tau}=-\frac{v}{l}(v_x\varphi_1+v_y\varphi_2) \tag{4}$$
把式(3)、式(4)代入式(2)，应用下列变换

$$\frac{\partial}{\partial v_x}=\frac{\partial}{\partial E}\frac{\partial E}{\partial v_x}=m\,v_x\frac{\partial}{\partial E}$$

$$\frac{\partial}{\partial v_y}=\frac{\partial}{\partial E}\frac{\partial E}{\partial v_y}=m\,v_y\frac{\partial}{\partial E}$$

式中，$E=\frac{1}{2}m(v_x^2+v_y^2+v_z^2)$。

进行简化时，应考虑到 $\varphi_1,\varphi_2$ 是一个小量值函数，在外场不很强的情况下（弱场近似），可把 $\mathscr{E}_i$ 和 $\varphi_j$ 的乘积项及 $\varphi_j$ 的微商项略去，但保留磁场 $\boldsymbol{B}$ 的所有项，得到

$$v_x\frac{\partial f_0}{\partial_x}+v_y\frac{\partial f_0}{\partial_y}-\frac{\partial f_0}{\partial E}(v_xq\mathscr{E}_x+v_yq\mathscr{E}_y)-\left(\frac{qv_y}{m}B\varphi_1-\frac{qv_x}{m}B\varphi_2\right)=-\frac{v}{l}(v_x\varphi_1+v_y\varphi_2) \tag{5}$$

令式(5)中等号两边 $v_x,v_y$ 的系数分别相等，得

$$\left.\begin{aligned}\frac{\partial f_0}{\partial_x}-q\,\mathscr{E}_x\frac{\partial f_0}{\partial E}&=-\frac{v}{l}\varphi_1-\frac{q}{m}B\varphi_2\\ \frac{\partial f_0}{\partial_y}-q\mathscr{E}_y\frac{\partial f_0}{\partial E}&=\frac{q}{m}B\varphi_1-\frac{v}{l}\varphi_2\end{aligned}\right\} \tag{6}$$

式(6)是关于 $\varphi_1$ 和 $\varphi_2$ 的线性方程，令

$$f_1=\frac{\partial f_0}{\partial_x}-q\,\mathscr{E}_x\frac{\partial f_0}{\partial E},f_2=\frac{\partial f_0}{\partial_y}-q\,\mathscr{E}_y\frac{\partial f_0}{\partial E}$$

代入式(6)可写成

$$-\frac{v}{l}\varphi_1-\frac{q}{m}B\varphi_2=f_1$$

$$\frac{q}{m}B\varphi_1-\frac{v}{l}\varphi_2=f_2 \tag{7}$$

解方程(7)，并令
$$k=\frac{ql}{m\,v}\boldsymbol{B}$$

得
$$\varphi_1=-\frac{1}{v}\frac{f_1-kf_2}{k^2+1}=-\tau\frac{f_1-kf_2}{k^2+1}$$

$$\varphi_2=-\frac{1}{v}\frac{f_2+kf_1}{k^2+1}=-\tau\frac{f_2+kf_1}{k^2+1}$$

由 $f_1,f_2$ 和 $k$ 的定义式可知 $\varphi_1,\varphi_2$ 确为 $\mathscr{E}$,$\boldsymbol{B}$ 和$v$ 的函数，但由于在化简时，把 $\varphi_1,\varphi_2$ 的微商项略去，故未能以显式表示它们与坐标的函数关系。把 $\varphi_1,\varphi_2$ 代回式(3)，即得到电子在电磁场中的分布函数 $f$

$$f=f_0-\tau v_x\frac{f_1-kf_2}{k^2+1}-\tau v_y\frac{f_2+kf_1}{k^2+1}$$

**【例 4-19】** 设有一均匀掺杂 n-GaAs 晶体，其平衡电子浓度为 $n_0$，由于介质中某些不均匀性或热扰动使电子浓度产生一增量 $\delta n$。

（1）试证

$$\delta n(t) = \delta(n_0)\mathrm{e}^{\beta(vt-x)}\mathrm{e}^{-t/\tau_D}$$

式中 $\beta=\omega/v$，$\omega$ 为电子波圆频率，$v$ 为电子漂移速度，$\tau_D$ 为介电弛豫时间。

（2）设微分迁移率 $\mu=2000\text{cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$，$n_0=5\times10^{15}\text{cm}^{-3}$，$\varepsilon_\gamma=13$，计算 $\tau_D$ 值。

（3）讨论 $\mu>0$ 和 $\mu<0$ 时空间电荷消长规律。

**证明：**（1）当有空间电荷增量 $\delta n$ 时，相应地电子速度改变 $\delta v$，电场强度改变 $\delta\varepsilon$，两者关系为

$$\delta v = \mu\delta\varepsilon \tag{1}$$

式中 $\mu=\partial v/\partial\varepsilon$ 是微分迁移率。设传导电流密度的变化为 $\delta J$，在一维情况下空间电荷随位置和时间的变化服从电流连续方程和泊松方程

$$\frac{\partial}{\partial x}(\delta J) + q\frac{\partial}{\partial t}(\delta n) = 0 \tag{2}$$

$$\frac{\partial}{\partial x}(\delta\varepsilon) = \frac{q}{\varepsilon_r\varepsilon_0}(\delta n) \tag{3}$$

忽略扩散电流和二级小量，$\delta J$ 可写为

$$\delta J = qn_0\mu\delta\varepsilon + qv\delta n \tag{4}$$

设 $n_0$、$\mu$、$v$ 与 $x$ 无关，则

$$\frac{\partial}{\partial x}(\delta J) = qn_0\mu\frac{\partial}{\partial x}(\delta\varepsilon) + qv\frac{\partial}{\partial x}(\delta n) \tag{5}$$

将式(3)代入后，得

$$\frac{\partial}{\partial x}(\delta J) = \frac{q^2 n_0\mu}{\varepsilon_r\varepsilon_0}(\delta n) + qv\frac{\partial}{\partial x}(\delta n) \tag{6}$$

因此式(2)变为

$$\frac{qn_0\mu}{\varepsilon_r\varepsilon_0}(\delta n) + v\frac{\partial}{\partial x}(\delta n) + \frac{\partial}{\partial t}(\delta n) = 0$$

令 $\tau_D=\varepsilon_r\varepsilon_0/q\mu n_0$，则上式写为

$$\frac{\partial}{\partial t}(\delta n) + v\frac{\partial}{\partial x}(\delta n) + \frac{1}{\tau_D}\delta n = 0 \tag{7}$$

设空间电荷波为平面波，上式具有

$$\delta n(t,x) = \delta n(0,x)\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega t-kx)} \tag{8}$$

形式的解，其中 $\omega$ 为圆频率，$k$ 为波数，将此式代入式(7)，得

$$k = \omega/v - \mathrm{i}/\tau_D v \tag{9}$$

$k$ 的实部与 $\beta=\omega/v$ 与 $\omega$ 成正比，电子波传播速度 $v=\omega/\beta$ 应等于电子漂移速度。$k$ 的虚部表示空间电荷波的消长情况。将式(9)代入式(8)给出式(7)的解

$$\begin{aligned}\delta n(t,x) &= \delta n(0,x)\mathrm{e}^{\beta(vt-x)}\mathrm{e}^{-x/\tau_D v}\\ &= \delta n(0,x)\mathrm{e}^{\beta(vt-x)}\mathrm{e}^{-t/\tau_D}\end{aligned} \tag{10}$$

(2) 代入题给条件，则介电弛豫时间

$$\tau_{\mathrm{D}}=\frac{\varepsilon_{\mathrm{r}}\varepsilon_0}{q\mu n_0}=\frac{13\times 8.85\times 10^{-12}}{1.6\times 10^{-19}\times 0.2\times 5\times 10^{21}}$$
$$=0.72\times 10^{-9}(\mu\mathrm{s})$$

(3) 从动坐标 $x=vt$ 上看，当微分迁移率 $\mu>0$，$\tau_{\mathrm{D}}$ 也为正值，由式(10)可知，$\delta n(t,x)$ 随时间 $t$ 按指数 $\mathrm{e}^{-t/\tau_{\mathrm{D}}}$ 衰减，表明任何空间电荷的扰动都将在 $\tau_{\mathrm{D}}$ 时间内趋于零。相反，若微分迁移率 $\mu<0$，$\tau_{\mathrm{D}}$ 也为负值，则任何小的空间电荷扰动都将使空间电荷随时间指数式增长，这时介电弛豫时间变成介电增长时间。这种空间电荷的增长正是耿氏效应的基础。

**【例 4-20】** 设有电场 $\mathscr{E}_x$、$\mathscr{E}_y$ 及磁场 $B_z$ 作用于金属中的自由电子，试证明在一级近似下，磁场不能改变电子的分布函数。

**证明**：在玻尔兹曼方程

$$\boldsymbol{v}\cdot\nabla_{\mathrm{r}}f+\boldsymbol{a}\cdot\nabla_{\mathrm{v}}f=-\frac{f-f_0}{\tau}$$

中，当同时存在电场$\mathscr{E}$和磁场 $\boldsymbol{B}$ 时，电子的加速度

$$a=\frac{F}{m}=-\frac{e}{m}(\boldsymbol{B}+\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B})$$

若样品没有温度梯度，$\nabla_{\mathrm{r}}f=0$，则可得到

$$-\frac{e}{m}(\boldsymbol{B}+\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B})\nabla_{\mathrm{v}}f=-\frac{f-f_0}{\tau}$$

或

$$f-f_0=\frac{e\tau}{m}(\mathscr{E}+\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B})\cdot\nabla_{\mathrm{v}}f$$

在一级近似下，方程右边用 $f_0$ 代替 $f$，便得

$$f-f_0=\frac{e\tau}{m}(\mathscr{E}+\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B})\cdot\nabla_{\mathrm{v}}f_0$$
$$=\frac{e\tau}{m}(\mathscr{E}+\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B})\cdot\frac{\partial f_0}{\partial E}\nabla_{\mathrm{v}}E \qquad (1)$$
$$=e\tau(\mathscr{E}+\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B})\cdot\frac{\partial f_0}{\partial E}\boldsymbol{v}$$

式(1)中应用了关系式$\boldsymbol{v}=\frac{1}{m}\nabla_{\mathrm{v}}E$。

由于$(\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B})\cdot\boldsymbol{v}=0$，式(1)变成

$$f-f_0=e\tau\frac{\partial f_0}{\partial E}\mathscr{E}\cdot\boldsymbol{v}=e\tau\frac{\partial f_0}{\partial E}(\mathscr{E}_x v_x+\mathscr{E}_y v_y) \qquad (2)$$

包含 $\boldsymbol{B}$ 的项在式(2)中全部消失，可见，虽然电场和磁场同时存在，但在一级近似下，分布函数的改变只由电场引起，磁场本身不能直接改变电子的分布函数。

# 第5章　非平衡载流子

**主题词**

平衡载流子和非平衡载流子，非平衡载流子的寿命，准费米能级，非平衡载流子的复合及复合机构，陷阱效应，载流子的漂移和扩散运动，扩散长度、扩散系数，爱因斯坦关系，电流密度方程，连续性方程。

## 5.1　理论概要与重点分析

(1) 除热激发外，还可用其他办法(如光注入，电注入，高能粒子辐射等)使半导体中的电子和空穴增加，超过热平衡时的浓度 $n_0$、$p_0$，这些超过热平衡的过剩载流子，称为非平衡载流子。非平衡载流子有非平衡多子(如 n 型中的电子，p 型中的空穴)和非平衡少子(如 n 型中的空穴和 p 型中的电子)之分，在一般情况下所说的非平衡载流子是指非平衡少子。许多半导体器件是以非平衡载流子作为工作的基础。

(2) 非平衡载流子产生后，通过半导体的内部作用复合而消失，每个非平衡载流子从产生到复合的生存时间有长有短，所有非平衡载流子平均生存时间，叫寿命，用 $\tau$ 表示。显然$\frac{1}{\tau}$为一个非平衡载流子在单位时间中的复合概率。

寿命的长短与半导体种类、掺杂浓度及性质、位错、缺陷、表面状况等密切相关。因而称寿命是半导体的一个“结构灵敏”参数。

由于非平衡载流子有一定的寿命，注入停止后，存在于半导体中的非平衡载流子数目因复合而随时间衰减，其衰减的规律为

$$\Delta p(t) = (\Delta p)_0 e^{-\frac{t}{\tau_p}}, \qquad 或\ \Delta n(t) = (\Delta n)_0 e^{-\frac{t}{\tau_n}} \tag{5.1}$$

式中，$\tau_p$，$\tau_n$ 分别为空穴和电子的寿命；$(\Delta p)_0$，$(\Delta n)_0$ 为注入刚停止时非平衡载流子浓度。

由式(5.1)可见，当 $t=\tau_p(\tau_n)$时，$\Delta p(\tau)=\frac{(\Delta p)_0}{e}$，即寿命是指非平衡载流子衰减到原来的 1/e 时所经历的时间。由式(5.1)不难证明，寿命 $\tau$ 就是非平衡载流子的平均生存时间。

(3) 寿命的长短主要取决于载流子的复合。引起复合的机制：按复合跃迁的方式分为直接复合和间接复合；按复合释能方式分为辐射复合和俄歇复合。

直接复合又称为带一带复合，导带中的电子直接落入价带与空穴发生的复合。由它所决定的寿命

$$\tau = \frac{1}{r[(n_0 + p_0) + \Delta p]} \tag{5.2}$$

小注入时有

$$\tau = \frac{1}{rn_0} \quad (\text{n 型}), \qquad \tau = \frac{1}{rp_0} \quad (\text{p 型}) \tag{5.3}$$

这种复合在直接带隙半导体或窄禁带半导体中容易发生。

在间接带隙半导体中，主要是通过一种叫做复合中心的杂质能级进行复合，在一种复合中心能级存在的情况下，导出其电子和空穴的净复合率为

$$u = \frac{N_t r_n r_p (np - n_i^2)}{r_n(n + n_1) + r_p(p + p_1)} \tag{5.4}$$

式中，$N_t$ 为复合中心浓度，$n_1 = N_c e^{-\frac{E_c - E_t}{k_0 T}}$，$p_1 = N_v e^{-\frac{E_t - E_v}{k_0 T}}$。利用上式，可以判断在某种条件下，半导体的某位置是否有净产生和净复合，以及能成为最有效复合中心杂质能级的位置是在禁带中线附近。

由间接复合所决定的寿命，在小注入情况下

$$\tau = \frac{\Delta p}{u} = \frac{r_n(n_0 + n_1) + r_p(p_0 + p_1)}{N_t r_n r_p (n_0 + p_0)} \tag{5.5}$$

对强 n 型和强 p 型材料，$\tau$ 可以分别简化为

$$\tau_p = \frac{1}{r_p N_t}, \qquad \tau_n = \frac{1}{r_n N_t} \tag{5.6}$$

因而，可用控制复合中心杂质浓度来调节半导体非平衡载流子的寿命。

(4) 半导体表面是缺陷和杂质比较集中的地方，因此有更多的复合中心存在，其复合概率比内部更大，则有内部的非平衡载流子流向表面，通过表面的复合中心复合，这仍然是间接复合。

表面复合率与表面处的非平衡载流子浓度成正比，写为

$$u_s = s(\Delta p)_s \tag{5.7}$$

式(5.7)表示在单位时间内通过单位表面积复合掉的非平衡载流子数。比例系数 $s$ 称为表面复合速度。它说明由于表面复合而失去的载流子数目，就如同表面处的非平衡载流子$(\Delta p)_s$ 都以 $s$ 大小的速度垂直流出表面。它可以表示为

$$s = \sigma_+ v_T N_{st} = r_p N_{st} \tag{5.8}$$

式中，$N_{st}$为表面复合中心浓度；$v_T$ 为载流子的热运动速度；$\sigma_+$ 为空穴的俘截面。其俘获系数 $r_p = \sigma_T v_T$。

(5) 在非平衡状态下，由于导带中的电子和价带中的空穴按能量在各自的能带中处于平衡分布，而导带与价带之间在总体上又是非平衡的。因此，就不能用一个费米能级来统一描写导带中的电子和价带中的空穴按能量的分布问题。因而引入准费米能级的概念。用 $E_F^n$ 描写导带中的电子，$E_F^p$ 描写价带中的空穴。这样在非平衡状态下，导带中的电子浓度

$$n = N_c \exp\left(\frac{E_c - E_F^n}{k_0 T}\right) = n_i \exp\left(\frac{E_F^n - E_c}{k_0 T}\right) \tag{5.9}$$

价带中的空穴浓度

$$p = N_v \exp\left(-\frac{E_F^n - E_v}{k_0 T}\right) = n_i \exp\left(\frac{E_i - E_F^p}{k_0 T}\right) \tag{5.10}$$

二者的乘积

$$np = n_i^2 \exp\left(\frac{E_F^n - E_F^p}{k_0 T}\right) \tag{5.11}$$

可见准费米能级分裂的程度，显示出与平衡态偏离的程度。

(6) 非平衡载流子的产生往往是非均匀的，即有浓度梯度存在，因而会产生扩散运动。由于扩散在单位时间流过单位面积的粒子数，称为扩散流密度，满足扩散定律

$$s_p = -D_p \frac{d\Delta p}{dx}, \qquad s_n = -D_n \frac{d\Delta n}{dx} \tag{5.12}$$

式中 $D_p$，$D_n$ 分别为空穴和电子的扩散系数，单位为 $cm^2/s$。载流子做定向扩散运动所形成的电流为：

空穴扩散电流

$$j_p = qs_p = -qD_p \frac{d\Delta p}{dx} \tag{5.13}$$

电子扩散电流

$$j_n = -qs_n = qD_n \frac{d\Delta n}{dx} \tag{5.14}$$

迁移率 $\mu$ 是反映在电场作用下载流子运动难易程度的物理量，而扩散系数 $D$ 是反映在有浓度梯度存在时，载流子运动难易程度的物理量，这两者必然有某种联系，这种联系就是爱因斯坦关系

$$\frac{D_p}{\mu_p} = \frac{k_0 T}{q}, \qquad \frac{D_n}{\mu_n} = \frac{k_0 T}{q} \tag{5.15}$$

(7) 在一块半导体中既存在电场又存在载流子的浓度梯度时，其总电流密度

$$\begin{aligned} j &= (nq\mu_n + pq\mu_p) \mid E \mid + qD_n \frac{d\Delta n}{dx} - qD_p \frac{d\Delta p}{dx} \\ &= q\mu_n\left(n \mid E \mid + \frac{k_0 T}{q} \frac{d\Delta n}{dx}\right) + q\mu_p\left(p \mid E \mid - \frac{k_0 T}{q} \frac{d\Delta p}{dx}\right) \end{aligned} \tag{5.16}$$

式中的第二步应用了爱因斯坦关系。式(5.16)便是在一维情况下半导体中的电流密度方程式。

(8) 在半导体中同时存在载流子的：①扩散，②漂移，③复合，④产生等运动形式。在一维情况下，载流子随时间、位置变化的规律满足连续性方程

$$\frac{\partial p}{\partial t} = D_p \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} - \mu_p p \frac{\partial \mid E \mid}{\partial x} - \mu_p \mid E \mid \frac{\partial p}{\partial x} - \frac{\Delta p}{\tau_p} + g_p \tag{5.17}$$

式中：$\frac{\partial p}{\partial t}$——由于上面四种运动引起的，在 $x$ 处单位时间单位体积中空穴的增加量；

$D_p \frac{\partial^2 p}{\partial x^2}$——由于扩散在 $x$ 处单位时间单位体积中空穴的积累数；

$-\mu_p p \frac{\partial |E|}{\partial x} - \mu_p |E| \frac{\partial p}{\partial x}$——由于漂移在 $x$ 处单位时间单位体积中空穴的积累数；

$\frac{\Delta p}{\tau_p}$——由于复合，单位时间单位体积中空穴的减少数；

$g_p$——由于其他原因在 $x$ 处单位时间单位体积中空穴的产生数。

对电子也有类似的方程

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D_n \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} + \mu_n \mid E \mid \frac{\partial n}{\partial x} + \mu_n n \frac{\partial \mid E \mid}{\partial x} - \frac{\Delta n}{\tau_n} + g_n \tag{5.18}$$

连续性方程是研究半导体器件工作状态的基本方程，在实际应用中，可根据物理模型和工作条件，省去其中的某些项，就得到了满足该模型条件下的微分方程。

例如：恒定光照射均匀的 n 型半导体在表面薄层中产生非平衡载流子，求解内部非平衡载流子的分布。

在此条件下

$$\frac{\partial p_0}{\partial x}=0, \quad |E|=0, \frac{\partial |E|}{\partial x}=0, \quad g_p=0, \quad \frac{\partial p}{\partial t}=0$$

故得方程

$$D_p \frac{d^2 \Delta p}{dx^2} - \frac{\Delta p}{\tau_p} = 0 \tag{5.19}$$

式(5.19)即为稳定纯扩散方程，如果样品有足够厚，即满足 $W \gg L_p$，则

$$\Delta p(x) = (\Delta p)_0 e^{-\frac{x}{L_p}} \tag{5.20}$$

式中，$(\Delta p)_0$ 为表面 $x=0$ 处的非平衡载流子浓度；$L_p = \sqrt{D_p \tau_p}$ 为扩散长度，它表示非平衡载流子在一边扩散一边复合的过程中，所有非平衡载流子深入样品的平均距离。

又如：对均匀的 p 型半导体进行光照，在其内部均匀产生非平衡载流子，当光照停止后，非平衡载流子随时间的衰减满足：$\frac{d\Delta n}{dt} = -\frac{\Delta n}{\tau_n}$。

总之，根据实际物理模型列出微分方程，再加上合适的初始条件和边界条件，就能得出相应的特定解，从而了解器件的工作状况。

在三维情况下，其连续性方程为

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{q} \nabla \cdot \boldsymbol{J}_p - \frac{\Delta p}{\tau_p} + g_p \tag{5.21}$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{q} \nabla \cdot \boldsymbol{J}_n - \frac{\Delta n}{\tau_n} + g_n \tag{5.22}$$

## 5.2 概念思考与练习题

**【5-1】** 半导体的平衡状态和非平衡状态有何不同？什么叫非平衡载流子？为什么说非平衡载流子一般是指非平衡少数载流子？

**【5-2】** 掺杂、改变温度和光照激发均能改变半导体的电导率，它们之间有何区别？试从物理意义上予以说明。

**【5-3】** 在平衡情况下，载流子有没有复合这种运动形式？为什么着重讨论非平衡载

流子的复合运动?

**【5-4】** 为什么不能用费米能级作为非平衡态下载流子浓度的计算标准而要引入准费米能级?费米能级和准费米能级有何区别?

**【5-5】** 在稳定不变的光照下,半导体中电子和空穴的浓度也是保持恒定不变的,但为什么说半导体处于非平衡状态?区分平衡态和稳定态。

**【5-6】** 一块 n 型半导体在强光本征激发下,导带电子和价带空穴均达到简并化,画出其准费米能级的位置,并写出电子和空穴浓度表达式。

**【5-7】** 说明非平衡载流子寿命的物理意义,非平衡载流子寿命长或短标志着什么?为什么说寿命是结构灵敏参数?

**【5-8】** 区别平均自由时间、弛豫时间和非平衡少子寿命三个物理量。

**【5-9】** 根据寿命的基本概念证明:$\tau=\frac{1}{p}$,式中 $p$ 为非平衡载流子的复合概率。

**【5-10】** 说明直接复合、间接复合的物理意义。为什么深能级才能起最有效的复合中心作用?说明硅中掺金后寿命为什么会明显降低?

**【5-11】** 根据费米能级位置填下面(见图 5-1)空白(大于、小于或等于):

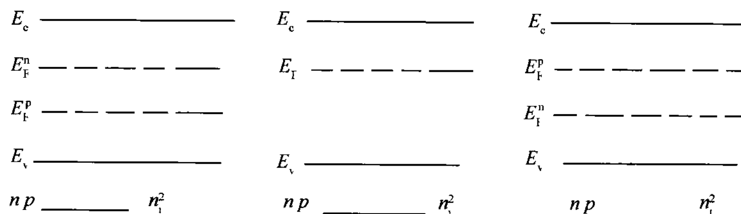



图 5-1　题 5-11 用图

**【5-12】** 什么叫俄歇复合过程?画图说明俄歇复合可能发生的几种过程。根据细致平衡原理推导俄歇复合过程的净复合率表达式。如何区分俄歇复合和直接辐射复合?

**【5-13】** 根据通过复合中心复合的公式:

$$u=\frac{N_t r_n r_p (n_p - n_i^2)}{r_n(n+n_1)+r_p(p+p_1)}$$

证明位于禁带中央附近的深能级是最有效的复合中心(设 $r_n=r_p$)。讨论小注入时少子寿命与半导体的掺杂种类和掺杂浓度的关系。

**【5-14】** 根据在稳定时,杂质能级上的电子数为:

$$n_t=N_t\frac{nr_n+p_1 r_p}{r_n(n+n_1)+r_p(p+p_1)}$$

证明杂质能级与费米能级重合时,是最有利于陷阱作用。

**【5-15】** 区别:复合效应和陷阱效应,复合中心和陷阱中心,俘获和复合,俘获截面和俘获概率。

**【5-16】** 简述热平衡载流子和非平衡载流子的产生和运动的特点。

【5-17】 为什么在用探针法测量半导体样品的电阻率时常常要将样品的被测表面打毛，而在制造集成电路和大多数半导体器件时要将半导体晶体的表面进行严格的抛光处理？

【5-18】 深能级杂质通常是有效复合中心，浅能级杂质可否在一定条件起复合中心作用？为什么？

【5-19】 介绍几种测量非平衡载流子寿命的方法和实验原理。

【5-20】 何谓表面复合？说明表面复合速度的物理意义。

【5-21】 求证：在必须用准费米能级的情况下，电子和空穴的准费米能级 $E_F^n$ 和 $E_F^p$ 同平衡态的费米能级 $E_F$ 的偏离为：

$$E_F^n - E_F = k_0 T \ln \frac{n_0 + \Delta n}{n_0}$$

$$E_F - E_F^p = k_0 T \ln \frac{p_0 + \Delta p}{p_0}$$

式中，$n_0$、$p_0$ 为热平衡载流子浓度；$\Delta n$、$\Delta p$ 为非平衡载流子浓度。

【5-22】 试说明(1)连续性方程是由什么物理定律写出的数学表达式？

(2)对于空穴，该方程左边为$\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}t}$，右边则有好几项，说明其中每一项各代表什么。

【5-23】 说明 $D$、$\mu$、$\tau$、$L$ 这 4 个参量之间的关系，检查他们各自的量纲和单位，讨论扩散系数与哪些物理量有关？

【5-24】 如何理解$\frac{D}{L}$代表扩散速度。

【5-25】 区别扩散长度，牵引长度和平均自由程这三个物理量。

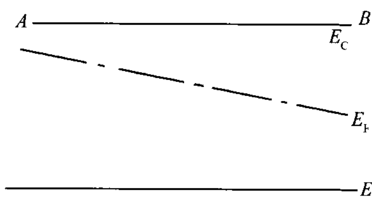


图 5-2 题 5-26 用图

【5-26】 如图 5-2 所示，在某种条件下，费米能级相对 $AB$ 能带发生倾斜，在这种情况下，是否存在：

(1)电子扩散流；(2)电子漂移流；(3)总电流。

【5-27】 光辐射均匀地照射在半导体样品上，并达到稳态。设 $t=0$ 时光辐射撤去。(1)写出 $t \geqslant 0$ 时少子浓度与时间的函数关系。(2)给出描述该函数关系的方程中全部符号的定义。

【5-28】 光辐射照到一个开路的细长条半导体样品的一端：

(1) 写出稳态时，少数载流子所满足的运动方程，并解出随距离的函数关系；

(2) 给出描述该函数关系的方程中的全部符号的定义；

(3) 当小注入时，少数载流子电流的主要成因是漂移、扩散，还是二者兼而有之？

(4) 多数载流子电流的主要成因是漂移、扩散，还是二者均有？

【5-29】 说明光电导测少子寿命的原理及实验方法。一块电阻率很高的 GaAs 单晶，其电子浓度 $n_0 = 4 \times 10^6 \mathrm{cm}^{-3}$，空穴浓度 $p_0 = 3 \times 10^7 \mathrm{cm}^{-3}$；样品经过仔细抛光，可以忽略表面复合的影响，试分析可否用光电导法测少数载流子的寿命。

【5-30】 图 5-3 为 p 型半导体在光照前后的三组能带图，问哪一组简图能正确地反

映这一变化情况。

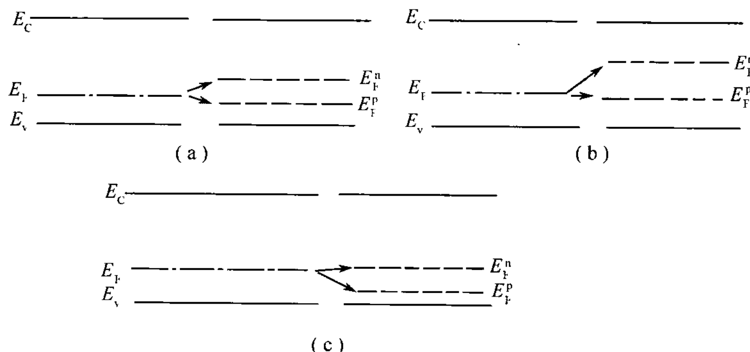



图 5-3　题 5-30 用图

**【5-31】** 为什么在非均匀掺杂的半导体中必然存在电场？若某 n 型半导体由于非均匀掺杂使体内存在自建电场 $E(x)=-\dfrac{\mathrm{d}V(x)}{\mathrm{d}x}$；已知电子浓度分布为

$$n(x)=N_c\mathrm{e}^{\frac{E_F+qv(x)-E_c}{k_0T}}$$

试用平衡条件证明爱因斯坦关系式。

**【5-32】** 某非均匀掺杂半导体，其导带电子浓度在 $x$ 方向上线性变化，即 $n(x)=n_i(1+ax)$

(1) 设费米能级随 $x$ 变化而变，求电场 $E(x)$；

(2) 如何保持样品处于热平衡状态？

(3) 设 $N_A=ax, N_D=N\mathrm{e}^{-ax}$，$a$ 为常数。分别求在这两种条件下的体内电场 $E(x)$，并画出两种条件下的能带图。

**【5-33】** 求证：禁带宽度为 $E_g$ 的半导体，在非衡态下其载流子浓度的乘积 $pn$ 与禁带宽度为 $E_g-(E_F^n-E_F^p)$ 的半导体的平衡载流子浓度乘积 $p_0n_0$ 相等。

**【5-34】** 利用非平衡载流子寿命表达式：

$$\tau=\tau_{n0}\frac{p_0+p_1}{n_0+p_0}+\tau_{p0}\frac{n_0+n_1}{n_0+p_0}$$

求载流子寿命为最大值时的费米能级位置，并讨论少子寿命 $\tau$ 与费米能级位置的关系。

**【5-35】** (1)由直接复合的定义确定电子留在导带和空穴留在价带的平均时间；

(2)载流子寿命和(1)中求得的平均时间有什么关系？由此关系分别讨论本征半导体和掺杂半导体。

**【5-36】** 如图 5-4 所示的样品，在 $AB$ 两端加有恒定的电场 $E$，若在 $t_1\sim t_2$ 时间内有一小信号电流注入如图中的 $C$、$D$ 所示，试定性地说明下列情况下载流子的输运情况。

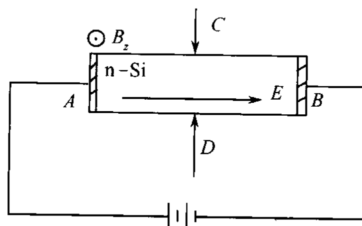



图 5-4　题 5-36 用图

(1) 样品上有强电场 $E$，且有小信号注入电流；

(2) 样品上有弱电场 $E$,且有小信号注入电流;

(3) 在样品加有与纸面垂直的磁场 $B_z$,同时还加有弱电场 $E$,且有小信号注入电流。

## 5.3 典型例题解析

**【例 5-1】** 某 n 型半导体硅,其掺杂浓度 $N_D=10^{15}\text{cm}^{-3}$,少子寿命 $\tau_p=5\mu s$,若由于外界作用,使其少数载流子全部被清除(如反向偏压的 pn 结附近),试求此时电子—空穴的产生率是多大(设 $n_i=1.5\times10^{10}\text{cm}^{-3}$)?

**解**: 因为少子浓度 $p=0$,所以有

$$\Delta_p = p - p_0 = - p_0$$

$p_0$ 为平衡时少子浓度,即

$$p_0 = \frac{n_i^2}{N_D} = \frac{(1.5\times10^{10})^2}{10^{15}} = 2.3\times10^5(\text{cm}^{-3})$$

由此得到复合率

$$R = \frac{\Delta p}{\tau_p} = \frac{-p_0}{\tau_p} \approx \frac{-2.3\times10^5}{5\times10^{-6}} \approx -1.3\times10^{11}[1/(\text{cm}\cdot\text{s})]$$

负的复合率代表电子—空穴的产生率。说明了在少子浓度为 0 的情况下,每秒钟每立方厘米产生 $1.3\times10^{11}$个电子—空穴对。

**【例 5-2】** 某 p 型半导体掺杂浓度 $N_A=10^{16}\text{cm}^{-3}$,少子寿命 $\tau_n=10\mu s$,在均匀光的照射下产生非平衡载流子,其产生率 $g=10^{18}\text{cm}^{-3}\cdot\text{s}$,试计算室温时光照情况下的费米能级并和原来无光照时的费米能级比较。(设本征载流子浓度 $n_i=10^{10}\text{cm}^{-3}$)。

**解**:(1) 无光照时,空穴浓度

$$p_0 = N_A = n_i e^{\frac{E_i-E_F}{T}}$$

所以

$$E_F = E_i - T\ln\frac{N_A}{n_i} = E_i - \frac{10^{16}}{10^{10}}$$

$$= E_i - 0.026\times6\times\ln10$$

即

$$E_F = E_i - 0.35(\text{eV})$$

说明无光照时,费米能级在禁带中线下面 0.35eV 处。

(2) 稳定光照后,产生的非平衡载流子为

$$\Delta n = \Delta p = g_L\tau_n = 10^{18}\times10^{-15} = 10^{13}(\text{cm}^{-3})$$

所以

$$p = p_0 + \Delta p = 10^{16} + 10^{13} \approx 10^{16}(\text{cm}^{-3})$$

$$n = n_0 + \Delta n = \frac{n_i^2}{N_D} + \Delta n = 10^4 + 10^{13}$$

$$\approx 10^{13}(\text{cm}^{-3})$$

又因为

$$p = n_i\exp\left(\frac{E_i - E_F^p}{k_0T}\right)$$

所以 $$E_i - E_F^p = k_0 T \ln \frac{p}{n_i} = 0.026 \ln \frac{10^{16}}{10^{10}} = 0.36(\text{eV})$$

$$n = n_i \exp\left(\frac{E_F^n - E_i}{k_0 T}\right)$$

故 $$E_F^n - E_i = k_0 T \ln \frac{n}{n_i} = 0.026 \ln \frac{10^{13}}{10^{10}} = 0.18(\text{eV})$$

上两式说明，$E_F^p$ 在 $E_i$ 之下，而 $E_F^n$ 在 $E_i$ 之上。且非平衡态时空穴的准费米能级和原来的费米能级几乎无差别，在电子的准费米能级相差甚远，如图 5-5 所示。

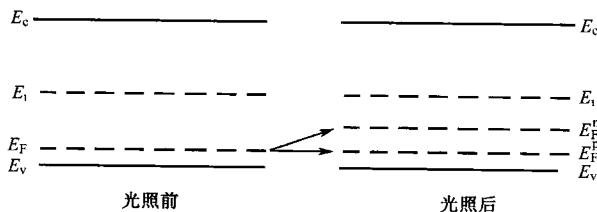



图 5-5　例 5-2 图

**【例 5-3】**　一掺铜的锗样品中含铜的浓度为 $10^{15}\text{cm}^{-3}$，含锑的浓度为 $10^{17}\text{cm}^{-3}$，其少子寿命在小注入条件下测得为 $10^{-7}\text{s}^{-1}$，设 $N_c = 1.04 \times 10^{19}\text{cm}^{-1}$。试求：

(1) 锗中铜能级是否为电离态？

(2) 若锗中空穴有效质量 $m_p^* = 0.30m_0$（$m_0$ 为电子的自由质量），求空穴的俘获截面？

(3) 随温度 $T$ 升高时，寿命 $\tau_p$ 是增加还是减少？

**解：**(1) 铜在锗中是一个多能级杂质元素，在锗中产生三个受主能级，靠近导带最近的一个受主能级 $E_A$ 在导带下 0.26eV，即 $E_c - E_A = 0.26\text{eV}$；根据杂质补偿可知，锗中电子浓度 $n_0 = 10^{17}\text{cm}^{-1}$（略去本征激发）。

所以 $$E_c - E_F = k_0 T \ln \frac{N_c}{n_0} = 0.026 \ln \frac{1.04 \times 10^{19}}{10^{17}} = 0.12(\text{eV})$$

故在热平衡时，铜能级位于费米能级 $E_F$ 以下，铜能级上填满了电子，呈受主态，因此铜能级是电离状态（带负电）。

(2) 空穴俘获系数 $$\gamma_p = \frac{1}{N_t \tau_p}$$

空穴俘获截面 $$\sigma_p = \frac{\gamma_p}{v_t} = \frac{1}{N_t v_t \tau_p}$$

式中，$v_t$ 为空穴的热运动速度，且有

$$v_t = \sqrt{\frac{3k_0 T}{m_p^*}} = \sqrt{\frac{3 \times 0.026}{0.3m_0}}$$

式中，$m_0 = 9.1 \times 10^{-31}\text{kg} = 0.568 \times 10^{-15}\text{eV} \cdot \text{s}^2/\text{cm}^2$，代入上式后

$$v_t = \sqrt{\frac{3 \times 0.026}{0.3 \times 0.568 \times 10^{-15}}} = 2.2 \times 10^7(\text{cm/s})$$

求得
$$\sigma_p=\frac{1}{2.2\times10^{7}\times10^{-7}\times10^{15}}=4.6\times10^{-6}(\mathrm{cm}^2)$$

(3) 随着温度增加，若不考虑 $N_t$ 的变化，显然 $T$ 增加引起 $v_t$ 增加。

因为
$$\tau_p=\frac{1}{N_t\gamma_p}=\frac{1}{N_t v_t\sigma_p}\quad 即\quad \tau_p\propto\frac{1}{v_t}$$

故少子寿命减小。实际上随温度改变，$\frac{n_0}{n_t}$ 也是在改变的，但铜能级是一个深能级，以至于 $n_t$ 变化甚微，所以略去了这一因素的影响。若陷阱能级（此题中的铜能级）不是很深，那么随温度上升，费米能级 $E_F$ 下降，$N_t$ 个陷阱能级上的电子数 $n_t$ 减小，从而使 $\tau_p$ 上升，最后将趋于阻止热运动速度项的影响。这一点在硅材料中容易发现，即随温度上升少子寿命不是下降而是上升。

**【例 5-4】** 假定 $\tau_n=\tau_p=\tau_0$ 是不随样品中的掺杂密度而改变的常数，试求出电导率为何数值时，样品的小信号寿命取极大值，并证明寿命的极大值为
$$t_{\max}=\tau_0\left(1+\cosh\frac{E_t-E_i}{kT}\right)$$

**解：** 设 $\tau_p=\frac{1}{N_t+r_p}$，$\tau_n=\frac{1}{N_t r_n}$，由小信号寿命公式(5.37)可得
$$\tau=\tau_0\left(1+\frac{n_1+p_1}{n_0+p_0}\right)$$

先求出使 $\tau$ 取极大值时的载流子密度。由 $\frac{\mathrm{d}\tau}{\mathrm{d}n_0}=0$，即
$$\tau_0(n_1+p_1)(-1)(n_0+p_0)^{-2}\left(1+\frac{\mathrm{d}p_0}{\mathrm{d}n_0}\right)=0$$

得
$$1+\frac{\mathrm{d}p_0}{\mathrm{d}n_0}=0$$

把 $n_0 p_0=n_i^2$ 代入上式，则有
$$1-\frac{n_i^2}{n_0^2}=0$$

即 $n_0=n_i$ 时，$\tau$ 取极大值。容易验证
$$\left.\frac{\mathrm{d}^2\tau}{\mathrm{d}n_0^2}\right|_{n_0=n_i}<0$$

所以，$n_0=n_i$，也就是样品的电导率等于本征电导率 $\sigma=e_{ni}(\mu_n+\mu_p)$ 时，寿命 $\tau$ 取极大值。

利用教材中 $n_1$ 和 $n_1$ 表达式(5-25)、式(5-31)，可求出
$$\tau_{\max}=\tau_0\left(1+\frac{n_1+p_1}{2n_i}\right)=\tau_0\left(1+\cosh\frac{E_t-E_i}{kT}\right)$$

**【例 5-5】** 设 $\tau_p=\tau_n=\tau_0$，试根据小信号寿命公式
$$\tau=\tau_p\frac{n_0+n_1}{n_0+p_0}+\tau_n\frac{p_0+p_1}{n_0+p_0}$$

讨论寿命 $\tau$ 与复合中心能级 $E_t$ 在禁带中位置的关系，并简单说明其物理意义。

**解**：由已知条件得出

$$\tau = \tau_0\left(1+\frac{n_1+p_1}{n_0+p_0}\right)$$

利用 $n_1=n_i\exp\left(\frac{E_t-E_i}{R_0T}\right)$，$p_1=n_i\exp\left(\frac{E_i-E_t}{R_0T}\right)$

$$\tau=\tau_0\left\{1+\frac{n_i}{n_0+p_0}\left[\exp\left(\frac{E_t-E_i}{kT}\right)+\exp\left(\frac{E_i-E_t}{kT}\right)\right]\right\}$$

$$=\tau_0\left[1+\frac{2n_i}{n_0+p_0}\cosh\frac{E_t-E_i}{kT}\right]$$

容易看出，当 $E_t\neq E_i$ 时，无论 $E_t$ 在 $E_i$ 的上方，还是在 $E_i$ 的下方，它与 $E_i$ 相距越远，第二项的数值就越大，即 $\tau$ 越大，复合中心的复合作用越弱。当 $E_t=E_i$ 时，$\tau$ 取极小值，即复合中心能级与本征费米能级重合时，复合中心的复合作用最强。这个结果也可以用与例题 5-4 相同的方法得出。

上述的一般性结论，其物理意义是明显的。当 $E_t$ 离开 $E_i$ 趋近 $E_c$ 或 $E_v$ 时，将有一种发射过程的概率越来越大，这就降低了复合中心的有效性。因为当复合中心俘获一个电子以后，为了完成复合过程，必须再俘获一个空穴。然而，如果 $E_t$ 逼近 $E_c$，将更有可能把俘获的电子重新发射回导带，从而阻碍了复合过程的完成。如果 $E_t$ 逼近 $E_i$，则发射电子和空穴的概率大致相等，这时复合中心是最有效的。

**【例 5-6】** 从复合动力学理论，证明深能级 $E_t$ 上单个电子和空穴的发射概率分别为

$$e_n(E_t,T)=\sigma_n V_{th}N_c\exp[-(E_c-E_t)/k_0T]$$
$$e_p(E_t,T)=\sigma_p V_{th}N_v\exp[-(E_t-E_v)/k_0T]$$

**证明**：(1) 电子的俘获过程：

电子的俘获速率正比于导带中自由电子浓席 $n$ 和没有为电子占有的复合中心浓度 $N_t(1-f)$。此处 $N_t$ 为半导体中的复合中心浓度，$f$ 是一个复合中心被一个电子占有的概率，平衡时

$$f=\frac{1}{1+e^{(E_t-E_F)/k_0T}} \tag{1}$$

式中，$E_t$ 为深能级(或者复合中心能级)，故电子的俘获速率为

$$\gamma_a\propto nN_t(1-f) \tag{2}$$

式中，比例常数用 $V_{th}\sigma_n$ 乘积来表示，即

$$\gamma_a=V_{th}\sigma_n nN_t(1-f) \tag{3}$$

式中，$V_{th}$ 为载流子平均热运动速度，$\sigma_n$ 为电子的俘获截面。

(2) 电子的发射过程：

电子的发射过程正比于已为电子占有的复合中心浓度 $N_tf$，故

$$\gamma_b=e_nN_tf \tag{4}$$

发射概率 $e_n$ 是电子从其占有复合中心跳到导带的概率。

(3) 空穴的俘获过程：

由于空穴的俘获相当于一个电子从一个复合中心跃迁到价带，它正比于为电子占有的复合中心浓度 $N_t f$，即

$$\gamma_c = V_{th}\sigma_p p N_t f \tag{5}$$

(4) 空穴的发射过程：

空穴的发射速率 $\gamma_d$ 为

$$\gamma_d = e_p N_t(1-f) \tag{6}$$

式中 $e_p$ 为空穴发射概率，即电子从价带跃迁到复合中心的概率，它正比于没有被占有的复合中心浓度 $N_t(1-f)$。

(5) 计算 $e_n$、$e_p$：

考虑平衡情况下，没有任何外部产生机构，故 $\gamma_a=\gamma_b$。得到

$$e_n \frac{f}{1-f} = V_{th}\sigma_n n \tag{7}$$

电子平衡浓度 $n$ 为

$$n = N_c \exp[-(E_c - E_F)/k_0 T] \tag{8}$$

将式(1)、式(8)代入式(7)中，于是可以得到

$$e_n(E_t,\ T) = V_{th}\sigma_n N_c \exp[-(E_c - E_t)/k_0 T] \tag{9}$$

同理，将 $\gamma_c=\gamma_d$，并把空穴平衡浓度公式代入后即可得到

$$e_p(E_t, T) = \sigma_p V_{th} N_v \exp[-(E_t - E_v)/k_0 T] \tag{10}$$

**【例 5-7】** 有一块半导体样品，它的空穴浓度如图 5-6 所示。

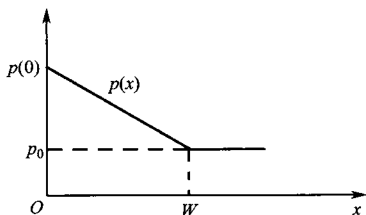



图 5-6 例 5-7 图

(1) 求无外加电场时的空穴电流密度 $J_p(x)$ 的表达式，并画出曲线；

(2) 设空穴浓度分布如图 5-2 所示，若使净空穴电流为零，试求所需内电场的表达式，并画出曲线；

(3) 若 $p(0)/p_0=10^3$，求 $x=0$ 和 $x=W$ 之间的电位差。

**解**：(1) 由图中曲线我们可以写出空穴浓度 $p(x)$ 的表示式如下：

$$p(x) = \begin{cases} \dfrac{p_0 - p(0)}{W} + p(0) = kx + p(0) & 0 < x < W \\ p_0 & x > W \end{cases}$$

式中

$$k = \frac{p_0 - p(0)}{W} < 0$$

由于扩散形成的空穴电流密度为

$$J_p(x) = -qD_p \frac{dp}{dx} = \begin{cases} -qD_p k & 0 < x < W \\ 0 & x > W \end{cases}$$

(2) 加外电场 $E(x)$后：

当空穴电流密度为 $J_p = q\mu_p p(x)E - qD_p \frac{dp}{dx} = 0$ 时，有

$$E(x) = \frac{qD_p \frac{dp}{dx}}{q\mu_k p(x)} = \frac{1}{p(x)} \frac{D_p}{\mu_p} \frac{dp}{dx}$$

故
$$E(x) = \begin{cases} \frac{1}{p(x)} \frac{D_p}{\mu_p} k & 0 < x < W \\ 0 & x > W \end{cases}$$

已知：$p(x) = kx + p(0)$，室温下的爱因斯坦关系

$$\frac{D_p}{\mu_p} = \frac{k_0 T}{q} = 0.026(\text{V})$$

代入后得

$$E(x) = \begin{cases} \frac{0.026k}{kx + p(0)} & 0 < x < W \\ 0 & x > W \end{cases}$$

曲线如图 5-7 所示。

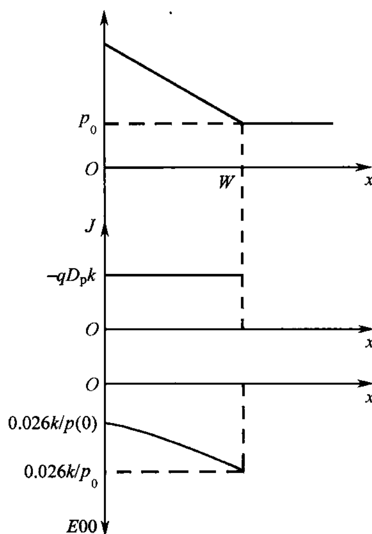



图 5-7　曲线图

(3) $x=0$ 到 $x=W$ 之间的电位差为

$$V = \int_0^W -\varepsilon dx = -\int_0^W \frac{0.026k dx}{kx + p(0)}$$
$$= -0.026\ln[kx + p(0)] \big|_0^W$$
$$= -0.026[\ln p_0 - \ln p(0)] = -0.026\ln\frac{p_0}{p(0)}$$

$$=-0.026\ln 10^{-3}=3\times 0.026\ln 10\approx 138.9(\text{mV})$$

**【例 5-8】** 设 $f_t$ 为复合中心能级 $E_t$ 被电子占据的概率，$N_c$ 和 $N_v$ 分别为导带和价带的有效状态密度。

(1) 解释下列方程的物理意义：

$$\frac{\mathrm{d}n}{\mathrm{d}t}=-\frac{n(1-f_t)}{\tau_n}+\frac{N_c f_t}{\tau'_n} \tag{1}$$

$$\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}t}=-\frac{pf_t}{\tau_p}+\frac{N_v(1-f_t)}{\tau'_p} \tag{2}$$

式中 $\tau_n$，$\tau'_n$，$\tau_p$ 和 $\tau'_p$是待定常数。求出 $\tau'_n$和 $\tau_n$ 及 $\tau'_p$和 $\tau_p$ 的关系；

(2) 假设复合中心密度 $N_t$ 不大，使 $\Delta p=\Delta n$ 成立，试证明

$$\frac{\mathrm{d}n}{\mathrm{d}t}=\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}t}=-\frac{np-n_i^2}{\tau_p(n+n_1)+\tau_n(p+p_1)} \tag{3}$$

式中

$$n_1=N_c\exp\left(-\frac{E_c-E_i}{k_0T}\right)$$

$$p_1=N_v\exp\left(-\frac{E_t-E_v}{k_0T}\right)$$

(3) 利用式(3)，求出小信号寿命公式。

**解：**(1) $\frac{n(1-f_t)}{\tau_n}$表示单位时间内在单位体积中复合中心从导带俘获的电子数，因为这个数目应该与导带的电子密度 $n$ 和复合中心能级空着的概率$(1-f_t)$成比例，而常数 $\tau_n$ 与复合中心密度和复合中心对电子的俘获截面有关。

$N_c f_t/t'_n$表示单位时间内在单位体积中复合中心向导带发射的电子数，因为这个数目应该与导带的有效状态密度 $N_c$ 和复合中心能级被电子占据的概率 $f_t$ 成比例。

对于导带电子密度增加的速率 $\mathrm{d}n/\mathrm{d}t$ 而言，前者是负的，而后者是正的，这就是式(1)的物理意义。对方程(2)，可以做完全类似的解释。

令

$$f_{t0}=\frac{1}{\exp\left(\frac{E_t-E_f}{kT}\right)+1}$$

表示热平衡情况下复合中心能级被电子占据的概率，利用热平衡条件 $\mathrm{d}n/\mathrm{d}t=0$，由式(1)可得

$$\frac{N_c f_{t0}}{\tau'_n}=\frac{n_0(1-f_{t0})}{\tau_n}$$

故

$$\frac{1}{\tau'_n}=\frac{1}{\tau_n}\cdot\frac{n_0}{N_c}\left(\frac{1}{f_{t0}}-1\right)=\frac{1}{\tau_n}\exp\left(-\frac{E_c-E_t}{k_0T}\right)$$

即

$$\frac{1}{\tau'_n}=\frac{1}{\tau_n}\cdot\frac{n_1}{N_c} \tag{4}$$

同理

$$\frac{1}{\tau'_p}=\frac{1}{\tau_p}\frac{p_1}{N_v} \tag{5}$$

(2) 由于 $\Delta p=\Delta n$,所以

$$\frac{dn}{dt}=\frac{dp}{dt}$$

把式(1)和式(2)代入上式,并利用式(4)和式(5),有

$$\frac{1}{\tau_n}[-n(1-f_t)+n_1 f_t]=\frac{1}{\tau_p}[-pf_t+p_1(1-f_t)]$$

解出 $f_t$,可得

$$f_t=\frac{\tau_p n+\tau_n p_1}{\tau_p(n+n_1)+\tau_n(p+p_1)}$$

将这个 $f_t$ 代回到式(1)或式(2)中,便得出

$$\frac{dn}{dt}=\frac{dp}{dt}=-\frac{np-n_i^2}{\tau_p(n+n_1)+\tau_n(p+p_1)}$$

在上式的推导中,利用了 $n_1 p_1=n_i^2$。

(3) 由于非平衡载流子只通过复合中心复合而减少,所以

$$\frac{dn}{dt}=\frac{dp}{dt}=-\frac{\Delta p}{\tau}$$

式中 $\Delta p/\tau$ 是非平衡载流子的净复合率。利用式(3),有

$$\frac{\Delta p}{\tau}=\frac{np-n_i^2}{\tau_p(n+n_1)+\tau_n(p+p_1)}$$

代入 $n=n_0+\Delta n$ 和 $p=p_0+\Delta p$,并利用小信号条件 $\Delta p\ll n_0+p_0$ 和 $\Delta n=\Delta p$,则得小信号寿命公式

$$\tau=\tau_p\frac{n_0+n_1}{n_0+p_0}+\tau_n\frac{p_0+p_1}{n_0+p_0}$$

**【例 5-9】** 一 n 型半导体样品中复合中心能级 $E_t$ 在导带底 $E_c$ 之下 $E_g/3$ 处($E_g$ 为禁带宽度),设 $\tau_p$ 和 $\tau_n$ 分别为空穴和电子的寿命且在同样数量级并与温度无关。试根据复合中心理论讨论寿命 $\tau$ 与温度 $T$ 关系,并根据得出的结论说明确定复合中心能级位置的方法。

**解:**复合中心理论给出的寿命公式为

$$\tau=\tau_p\frac{n_0+n_1}{n_0+p_0}+\tau_n\frac{p_0+p_1}{n_0+p_0}$$

对于确定的样品,当温度变化时,$n_0$,$p_0$,$n_1$ 和 $p_1$ 都要随之改变,从而引起 $\tau$ 的变化。下面按照温度由低到高,划分几个区进行讨论。

(1) 温度从热力学零度开始上升,费米能级将从导带底附近单调下降(忽略 0K 附近微小的上升),一直到费米能级与复合中心能级重合。在这个温度范围内,施主杂质由弱电离最后过渡到饱和电离,$n_0\gg p_0$,$n_1$,$p_1$,所以

$$\tau \approx \tau_p = \frac{1}{N_t \gamma_p}$$

即寿命是常数。严格上讲，$\gamma_p$（空穴俘获系数）随温度上升而略有上升，故 $\tau_p$ 随温度上升而略有增加。

（2）温度再升高，费米能级继续下降，一直到饱和电离区的最高温度。在此温度区内，$n_0$ 是常数，并且

$$n_0 \gg p_0, n_0 \gg p_1, n_1 \gg n_0$$

故
$$\tau \approx \tau_p \frac{n_1}{n_0} = AT^{2/3} \exp\left(-\frac{E_c - E_t}{kT}\right)$$

式中，$A$ 是与 $T$ 无关的常数。

由上式可见，$\tau$ 与温度的关系主要由指数项决定，$\ln t \sim 1/T$ 基本上是线性关系，且随温度的升高，$\tau$ 单调地增大。因此，根据实验数据画出直线 $\ln\tau \sim 1/T$，由斜率可确定复合中心能级的位置（$E_c - E_t$）。

（3）温度继续上升到接近本征导电区以后，有

$$n_0 \approx p_0 = n_i$$

故
$$\tau \approx \frac{\tau_p}{2}\left(1 + \frac{n_1}{n_i}\right) + \frac{\tau_n}{2}\left(1 + \frac{p_1}{n_i}\right)$$
$$= \frac{\tau_p}{2}\left[1 + \exp\left(\frac{E_t - E_i}{kT}\right)\right] + \frac{\tau_n}{2}\left[1 + \exp\left(\frac{E_i - E_t}{kT}\right)\right]$$

根据温度的高低，可以再分成两个区来讨论：

① $E_t - E_i \gg kT$ 时，有

$$\tau \approx \frac{\tau_p}{2} \exp\left(\frac{E_t - E_i}{kT}\right)$$

本征费米能级

$$E_i = \frac{1}{2}(E_c + E_v) + \frac{1}{2} kT \ln\left(\frac{N_v}{N_c}\right)$$

故
$$\tau \approx B \exp\left[\frac{E_t - (E_c + E_v)/2}{kT}\right]$$

式中，$B$ 为与 $T$ 无关的常数。

可见，$\ln\tau \sim 1/T$ 是直线关系，且随着温度的升高，$\tau$ 单调地减小，由直线的斜率可以确定复合中心能级和禁带中心的间距。

② $E_t - E_i \ll kT$ 时，有

$$\tau \approx \tau_p + \tau_n$$

即寿命又变成常数。

在图 5-8 中画出 $n_0$，$E_F$ 和 $\tau$ 随温度 $T$ 变化的示意图。

**【例 5-10】** 如图 5-9 所示，一个很长的 n 型半导体样品，其中心附近长度为 $2a$ 的范围内被光照射。假定光均匀地穿透样品，电子—空穴对的产生率为 $g$（$g$ 为常数），试求出

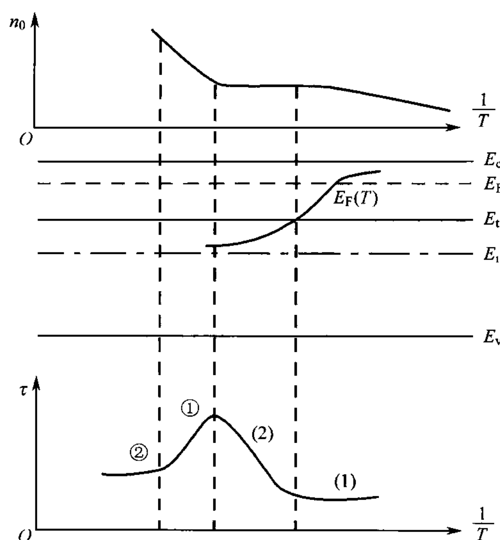



图 5-8　$E_F$ 与 $\tau$ 随温度 $T$ 变化的曲线图

小注入情况下样品中稳态少子分布。

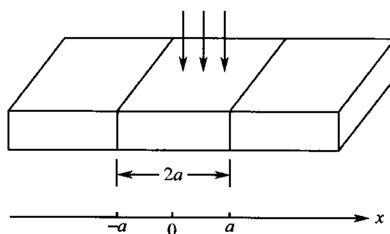



图 5-9　例 5-10 图

**解：**令 $x$ 轴沿着样品长的方向，原点取在样品的中心，所以光照限制在 $-a \leqslant x \leqslant +a$ 范围内，根据样品很长的假设，可以认为是一维非平衡少子扩散的问题。在稳态情况下，少子的连续性方程可写为

$$D_p \frac{d^2 \Delta p_1}{dx^2} - \frac{\Delta p_1}{\tau} + g = 0 \quad (-a < x < +a) \tag{1}$$

$$D_p \frac{d^2 \Delta p_2}{dx^2} - \frac{\Delta p_2}{\tau} = 0 \quad (x > a) \tag{2}$$

$$D_p \frac{d^2 \Delta p_3}{dx^2} - \frac{\Delta p_3}{\tau} = 0 \quad (x < -a) \tag{3}$$

为了方便，把式(1)的解写成

$$\Delta p_1 = g\tau + A\cosh \frac{x}{L_p} + B\sinh - \frac{x}{L_p}$$

式中 $L_p = \sqrt{D_p \tau}$。因为少子分布相对于原点是对称的，故必有 $B=0$。

所以 $$\Delta p_1 = g\tau + A\cosh\frac{x}{L_p} \tag{4}$$

式(2)和式(3)的解分别是

$$\Delta p_2 = Ce^{-x/L_p} + De^{x/L}$$
$$\Delta p_3 = Ee^{-x/L_p} + Fe^{x/L}$$

当 $x$ 是很大的正值时，$\Delta p_2$ 的值应趋于零，所以 $D=0$。同理，$E=0$，即

$$\Delta p_2 = Ce^{-x/L} \tag{5}$$
$$\Delta p_3 = Fe^{x/L} \tag{6}$$

因为 $\Delta p_2$ 和 $\Delta p_3$ 相对于原点应该是对称的，所以 $C=F$。

将式(4)和式(5)代入边界条件

$$\Delta p_1 \big|_{x=a} = \Delta p_2 \big|_{x=a}$$
$$\frac{d\Delta p_1}{dx}\bigg|_{x=a} = \frac{d\Delta p_2}{dx}\bigg|_{x=a}$$

则得出

$$\begin{cases} A\cosh\dfrac{a}{L_p} - Ce^{-a/L_p} = -g\tau \\ A\sinh\dfrac{a}{L_p} + Ce^{-a/L_p} = 0 \end{cases}$$

解方程组得

$$A = -g\tau e^{-a/L_p}$$
$$C = g\tau\sinh\frac{a}{L_p}$$

于是式(4)、式(5)和式(6)可写成

$$\Delta p_1 = g\tau\left(1 - e^{-a/L_p}\cosh\frac{x}{L_p}\right) \qquad (-a \leqslant x < a)$$
$$\Delta p_2 = g\tau\sinh\frac{a}{L_p}e^{-x/L_p} \qquad (x > a)$$
$$\Delta p_3 = g\tau\sinh\frac{a}{L_p}e^{x/L_p} \qquad (x < -a)$$

**【例 5-11】** 验证少数载流子漂移和扩散的实验，最先是由海恩斯—萧克莱完成的，其装置如图 5-10 所示。今欲测量 n-Si 样品，其长度为 2cm，探针 e、c 间距离 $d=1.6$cm，$E_1=16$V，脉冲电压在探针 e 注入后，经过 0.4ms 后到达探针 c，其脉冲宽度为 72.12$\mu$s，试计算 $\mu_p$、$D_p$。并将计算结果核算爱因斯坦关系式。

**解：**(1) 计算 $\mu_p$：

在脉冲发生器正向脉冲作用下，从探针 e 向样品中注入空穴，电池 $E_1$ 在样品中产生均匀的电场$\mathscr{E}$，使空穴由 e 向 c 漂移，并且不断地扩散和复合。当它们到达 c 点时，便立刻被负偏压($E_2$ 使收集探针 c 相对于样品加有负偏压)的探针 c 所收集。此时，漂移速度为

$$V_p = d/t_d$$

式中 $d$ 表示脉冲中心由 e 漂移到 c 所走的距离，其经历的时间即为 0.4ms，故 $V_p=$

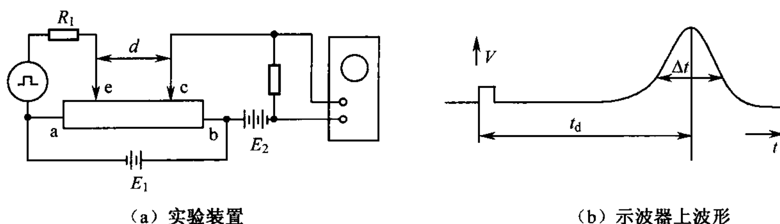



图 5-10　海恩斯—萧克莱实验

1.6/0.4=4000cm/s。

漂移迁移率为

$$\mu_p = V_p/\mathscr{E}$$

按题意 $\mathscr{E}$=16/2=8V/cm，故

$$\mu_p = 4000/8 = 500[\mathrm{cm^2/(V\cdot s)}]$$

（2）计算 $D_p$：

在此期间，脉冲因扩散而伸展一定宽度，脉冲前沿和后沿于不同的时间达到收集极c，时间间隔为 $\Delta t$。若设脉冲伸展的宽度为 $\Delta x$，则

$$\Delta x = V_p \cdot \Delta t$$

而脉冲的半宽度为 $\Delta x/2=(4D_pt_d)^{1/2}$，代入即可得到

$$D_p = \frac{(V_p\cdot\Delta t)^2}{16t_d} = \frac{(d\Delta t)^2}{16t_d^3}$$

假设收集极 c 处收集到空穴流密度与所增加的收集电流成比例，则此处的 $\Delta t$ 即为脉冲宽度。这样

$$D_p = \frac{(1.6\times 72.12)^2}{16\times(0.4)^3} = 13(\mathrm{cm^2/s})$$

（3）核算：

根据爱因斯坦公式 $D_p/\mu_p=k_0T/q$，在 300K 时 $k_0T/q$=0.026V，此时 $D_p$=13cm²/s，$\mu_p$=500cm²/(V·s)，则

$$D_p/\mu_p = 13/500 = 0.026(\mathrm{V})$$

**【例 5-12】** 设一均匀的 n 型 Si 样品，在左半部用一稳定的光照射（见图 5-11），均匀产生电子—空穴对，产生率为 $g_0$，若样品足够长，试求稳态时样品两边的空穴浓度分布。

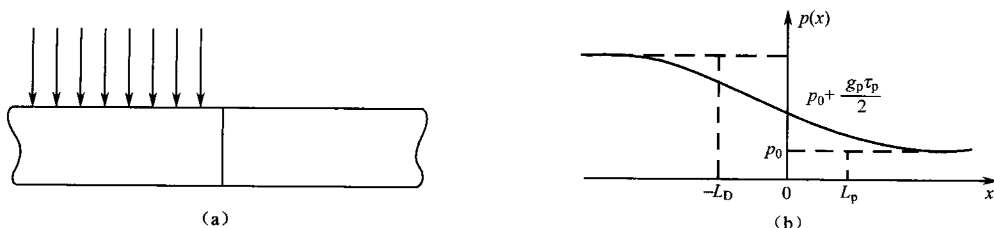



图 5-11　例 5-12 图

**解**：设左右分界处为

$$x - 0$$

依题意，连续性方程可分段写为

$$\frac{\partial p}{\partial t} = D_p \frac{d^2 p}{dx^2} - \frac{p - p_0}{\tau_p} + g_0 \quad (x \leqslant 0)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = D_p \frac{d^2 p}{dx^2} - \frac{p - p_0}{\tau_p} \quad (x \geqslant 0)$$

稳态时，$\frac{\partial p}{\partial t}=0$，得

$$D_p \frac{d^2 p}{dx^2} - \frac{p - p_0}{\tau_p} + g_0 = 0 \quad (x \leqslant 0) \tag{1}$$

$$D_p \frac{d^2 p}{dx^2} - \frac{p - p_0}{\tau_p} - 0 \quad (x \geqslant 0) \tag{2}$$

解式(1)得 $$p(x)=p_0+g_0\tau_p+Ae^{-\frac{x}{L_p}}+Be^{\frac{x}{L_p}} \quad (x\leqslant 0) \tag{3}$$

解式(2)得 $$p(x)=p_0+A_1 e^{-\frac{x}{L_p}}+B_1 e^{+\frac{x}{L_p}} \quad (x\leqslant 0) \tag{4}$$

式中，$L_p=\sqrt{\tau_p D_p}$。

因为 $p(x)$ 为连续函数，故

$$p(0^-) = p0^+$$

且 $$\left(\frac{dp}{dx}\right)_{x-0^-} = \left(\frac{dp}{dx}\right)_{x-0^+} \tag{5}$$

又因为样品足够大，$p(x)$ 在→∞时不可能成为无穷大，所以：

在 $x\leqslant 0$ 区域 $\quad A=0$

在 $x>0$ 区域 $\quad B_1=0$

根据连续性条件式(5)得

$$\frac{B}{L_p} = -\frac{A_1}{L_p}$$

故 $B=-A_1$。

因为 $p(0^+)=p(0^-)$，故

$$A_1=g_0\tau_p+B=g_0\tau_p-A_1$$

且 $$A_1=\frac{1}{2}g_0\tau_p \qquad B=-\frac{1}{2}g_0\tau_p$$

所以 $$p(x)=p_0+g_0\tau_p-\frac{1}{2}g_0\tau_p e^{\frac{x}{L_p}} \qquad (x\leqslant 0)$$

$$p(x)=p_0+\frac{1}{2}g_0\tau_p e^{-\frac{x}{L_p}} \qquad (x\geqslant 0)$$

其函数图形如图 5-11(b)所示。

**【例 5-13】** 用适当频率的方脉冲照射到某 n 型半导体样品上，被样品内部均匀吸收并产生非平衡载流子，其产生率为 $g_p$，非平衡空穴的寿命为 $\tau_p$，光脉冲宽度 $\Delta t=3\tau_p$。

(1) 试写出在该脉冲光开始照射到结束以后，非平衡空穴所满足的方程式；

(2) 设 $t=0$(这时的 $\Delta p=0$)的瞬时，脉冲光开始照射，试求出脉冲开始到结束后的整个时间内，非平衡空穴随时间变化的规律，用图示意之；

(3) 在用直流光电导衰减法测非平衡载流子寿命的试验中，在示波器上观察的是哪一段曲线？所谓寿命是指曲线上哪一段时间，由此如何定义非平衡载流子的寿命？

**解**：(1) 设脉冲光开始照射的瞬间 $t=0$，则非平衡空穴所满足的方程为

$$\frac{\mathrm{d}\Delta_{\mathrm{p}}}{\mathrm{d}t}=g_{\mathrm{p}}-\frac{\Delta_{\mathrm{p}}}{\tau_{\mathrm{p}}}\qquad(0\leqslant t\leqslant\Delta t)\tag{1}$$

$$\frac{\mathrm{d}_{\mathrm{p}}}{\mathrm{d}t}=-\frac{\Delta_{\mathrm{p}}}{\tau_{\mathrm{p}}}\qquad(t\geqslant\Delta t)\tag{2}$$

(2) 解式(1)得

$$\frac{\mathrm{d}\Delta_{\mathrm{p}}}{\mathrm{d}t}=\frac{g_{\mathrm{p}}\tau_{\mathrm{p}}-\Delta p}{\tau_{\mathrm{p}}}$$

$$\frac{\mathrm{d}(\Delta p-g_{\mathrm{p}}\tau_{\mathrm{p}})}{\Delta p-g_{\mathrm{p}}\tau_{\mathrm{p}}}=-\frac{\mathrm{d}t}{\tau_{\mathrm{p}}}$$

$$\ln(\Delta p-g_{\mathrm{p}}\tau_{\mathrm{p}})=-\frac{t}{\tau_{\mathrm{p}}}+C$$

即

$$\Delta p-g_{\mathrm{p}}\tau_{\mathrm{p}}=\mathrm{e}^{-\frac{t}{\tau_{\mathrm{p}}}+C}=C'\mathrm{e}^{-\frac{t}{\tau_{\mathrm{p}}}}$$

当 $t=0$ 时，将 $\Delta p=0$ 代入上式得：$C'=-g_{\mathrm{p}}\tau_{\mathrm{p}}$，故

$$\Delta p=g_{\mathrm{p}}\tau_{\mathrm{p}}(1-\mathrm{e}^{\frac{t}{\tau_{\mathrm{p}}}})\qquad(0\leqslant t<\Delta t)$$

解式(2)得

$$\Delta p=C\mathrm{e}^{\frac{t}{\tau_{\mathrm{p}}}}$$

当

$$t=\Delta t\quad\Delta p(\Delta t)=g_{\mathrm{p}}\tau_{\mathrm{p}}(1-\mathrm{e}^{\frac{3\tau_{\mathrm{p}}}{\tau_{\mathrm{p}}}})$$

$$=g_{\mathrm{p}}\tau_{\mathrm{p}}\left(1-\frac{1}{\mathrm{e}^{3}}\right)\qquad(0\leqslant t<\Delta t)$$

$$\Delta p(\Delta t)=C\mathrm{e}^{\frac{3\tau_{\mathrm{p}}}{\tau_{\mathrm{p}}}}=C\mathrm{e}^{3}\qquad(t\geqslant\Delta t)$$

由连续条件得

$$g_{\mathrm{p}}\tau_{\mathrm{p}}\left(1-\frac{1}{\mathrm{e}^{3}}\right)=C\mathrm{e}^{-3}$$

$$C=\frac{g_{\mathrm{p}}\tau_{\mathrm{p}}(1-\mathrm{e}^{-3})}{\mathrm{e}^{-3}}$$

故

$$\Delta p(t)=g_{\mathrm{p}}\tau_{\mathrm{p}}(\mathrm{e}^{3}-1)\mathrm{e}^{-\frac{t}{\tau_{\mathrm{p}}}}\qquad(t\geqslant\Delta t)$$

在 $0\leqslant t<\Delta t$ 时有

$$\Delta p(t)=g_{\mathrm{p}}\tau_{\mathrm{p}}(1-\mathrm{e}^{-\frac{t}{\tau_{\mathrm{p}}}})$$

(3) 在用直流光电导衰减法测非平衡载流子寿命时，观察到的为 $t=3\tau_{\mathrm{p}}$ 以后的那部分曲线。

当 $t=3\tau_{\mathrm{p}}$ 时有 $\qquad\Delta p(3\tau_{\mathrm{p}})=g_{\mathrm{p}}\tau_{\mathrm{p}}(1-\mathrm{e}^{-3})=\Delta p_{0}$

当 $t=4\tau_{\mathrm{p}}$ 时有 $\qquad\Delta p(4\tau_{\mathrm{p}})=g_{\mathrm{p}}\tau_{\mathrm{p}}(\mathrm{e}^{3}-1)\mathrm{e}^{-4}$

$$=\frac{g_{\mathrm{p}}\tau_{\mathrm{p}}(1-\mathrm{e}^{-3})}{\mathrm{e}}=\frac{\Delta p_{0}}{\mathrm{e}}$$

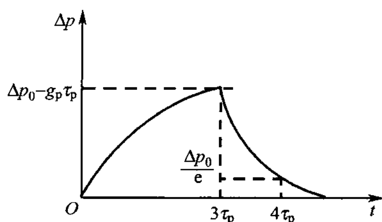



图 5-12　例 5-13 图

故所谓寿命是指 $3\tau_p \sim 4\tau_p$ 曲线对应的时间，如图 5-12 所示。

**【例 5-14】** 在一块 p 型半导体中，有一种复合—产生中心，小注入时被这些中心俘获的电子发射回导带的过程和它与空穴复合的过程有相同的概率。试求这种复合—产生中心的能级位置，并说明它能否成为有效的复合中心？

**解：** 设

$$n_1 = N_c e^{-\frac{E_c - E_t}{k_0 T}}$$

过程中产生的电子数$=s_- \cdot n_t$，$s_- = r_n n_1$ 为电子激发概率。

$E_t$ 能级上的电子发射回价带的数目，即 $E_t$ 能级俘获空穴数目为 $r_p p n_t$。其中 $r_p p$ 为空穴俘获概率。

由题条件知　　$s = r_n n_1 = r_p p$

对于一般复合中心有　　$r_n \approx r_p$　　（或相差甚小）

故在小注入条件下，由 $n_1 = p = p_0 + \Delta p$ 可得

$$n_1 \approx p_0$$

即

$$N_c e^{\frac{E_t \quad E_0}{k_0 T}} = N_v e^{\frac{E_v \quad E_F}{k_0 T}}$$

故

$$E_t = E_c + E_v - E_F - k_0 T \ln \frac{N_c}{N_v}$$

因为本征费米能级

$$E_i = \frac{1}{2}\left(E_c + E_v - k_0 T \ln \frac{N_c}{N_v}\right)$$

故 $E_t = 2E_i - E_F$ 可写成

$$E_t - E_i = E_i - E_F$$

一般 p 型半导体室温下 $E_F$ 远在 $E_i$ 之下。所以，$E_t$ 远在 $E_i$ 之上；故 $E_t$ 不是有效复合中心。

**【例 5-15】** 光照一个 $1\Omega \cdot cm$ 的 n 型硅样品，均匀地产生非平衡载流子，电子—空穴对的产生率为 $10^{17} cm^{-3} \cdot s^{-1}$。设样品的寿命为 $10\mu s$，表面复合速度为 100cm/s。试计算：

(1) 单位时间、单位表面积在表面复合空穴数；

(2) 单位时间、单位表面积在离表面三个扩散长度中体内复合掉的空穴数。

**解：**(1) 设单位时间、单位表面积在表面复合的空穴数即复合率 $u_s$ 为

$$u_s = s_p[p(x) - p_0]\,|_{x=0}$$

式中 $s_p$ 为表面复合速度。

又

$$p(x) = p_0 + \tau_p g_p \left(1 - \frac{s_p \tau_p}{L_p + s_p \tau_p} e^{-\frac{x}{L_p}}\right)$$

在 $x=0$ 处有 $$p(0)-p_0=\tau_p g_p\left(1-\frac{s_p\tau_p}{L_p+s_p\tau_p}\right)$$

对 $\rho=1\Omega\cdot\text{cm}$ 的 n-Si 查表得

$$N_D=5\times10^{15}/\text{cm}^3,\mu_p=400[\text{cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})]$$

故

$$L_p=\sqrt{\frac{k_0T}{q}\mu_p\tau_p}=\sqrt{\frac{1}{40}\times400\times10\times10^{-6}}=10^{-2}(\text{cm})$$

代入上式后得

$$p(0)-p_0=10\times10^{-6}\times10^{17}\times\left(1-\frac{100\times10^{-6}\times10}{10^{-2}+100\times10^{-6}\times10}\right)=10^{12}\left(1-\frac{10^{-3}}{10^{-2}+10^{-3}}\right)$$

所以

$$p(0)-p_0=0.91\times10^{12}(1/\text{cm}^3)$$

故

$$u_s=s_p[p(0)-p_0]=0.91\times10^{12}\times100=9.1\times10^{13}(1/\text{cm}^2\cdot\text{s})$$

(2) 求 $\Delta p=\int_0^{3L_p}p(x)\mathrm{d}x-\int_0^{3L_p}p_0\mathrm{d}x$

又

$$p(x)=p_0+\tau_p g_p\left[1-\frac{s_p\tau_p}{L_p+s_p\tau_p}e^{-\frac{x}{L_p}}\right]$$

所以

$$\Delta p=\int_0^{3L_p}\tau_p g_p\left(1-\frac{s_p\tau_p}{L_p+s_p\tau_p}e^{-\frac{x}{L_p}}\right)\mathrm{d}x=3\tau_p g_p L_p+\frac{g_p s_p\tau_p L_p}{L_p+s_p\tau_p}e^{-\frac{x}{L_p}}\Bigg|_0^{3L_p}$$

代入数据得

$$\Delta p=3\times10\times10^{-6}\times10^{17}\times10^{-2}+\frac{10^{17}\times100\times(10\times10^{-6})^2\times10^{-2}}{10^{-2}+10^2\times10\times10^{-6}}(e^{-3}-1)=2.9\times10^{10}(\text{cm}^{-2})$$

故单位时间复合掉的空穴数为

$$\frac{\Delta p}{\tau}=\frac{2.9\times10^{10}}{10^{-5}}=2.9\times10^{15}(1/\text{cm}^2\cdot\text{s})$$

**【例 5-16】** 一个 n 型锗样品，电阻率 $\rho=10\Omega\cdot\text{cm}$。设复合中心能级 $E_t$ 在价带顶之上 0.22eV 处，$\tau_n=100\mu\text{s}$，$\tau_p=10\mu\text{s}$，求室温下样品的寿命 $\tau$（设 $N_c\approx N_v=10^{19}\text{cm}^{-3}$）。

**解：** 用萧克莱一瑞德(Shokley-Read)公式计算寿命 $\tau$，必须先求出 $n_0$，$p_0$，$n_1$ 和 $p_1$ 的值。

在室温下，可近似地认为该样品是在饱和电离区，因而

$$n_0=\frac{1}{\rho q\mu_n}=\frac{1}{10\times1.6\times10^{-19}\times3900}=1.6\times10^{14}(1/\text{cm}^3)$$

为了比较 $n_0$、$p_0$、$n_1$ 和 $p_1$ 的相对大小，求出费米能级 $E_F$

$$E_F = E_c - kT\ln\frac{N_c}{n_0} = E_c - 0.026\ln\frac{10^{19}}{1.6\times10^{14}} = E_c - 0.29(\text{eV})$$

由图 5-13 容易看出，

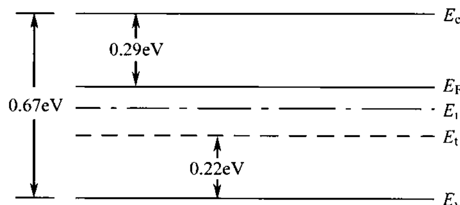



图 5-13　例 5-16 图

$$n_0 \gg p_0, n_0 \gg n_1, p_1 \gg p_0$$

$$p_1 = N_v e^{-\frac{E_t - E_v}{kT}} = 10^{19}\cdot e^{-\frac{0.22}{0.026}}$$
$$= 2.1\times10^{15}(1/\text{cm}^3)$$

所以

$$\tau = \tau_p\frac{n_0+n_1}{n_0+p_0} + \tau_n\frac{p_0+p_1}{n_0+p_0}$$
$$\approx \tau_p + \tau_n\frac{p_1}{n_0}$$
$$\approx \tau_n\frac{p_1}{n_0} = 100\times\frac{2.1\times10^{15}}{1.6\times10^{14}} \approx 1313(\mu\text{s})$$

**【例 5-17】** 今用光照射一块较厚的 n 型硅样品，光被样品均匀吸收，如图 5-14 所示：求证当外电路开路时，硅片正面与背面间产生的光扩散电动势差为

$$V(0) - V(W) = k_0T/q\frac{\mu_n - \mu_p}{n\mu_n}(\Delta p)_0$$

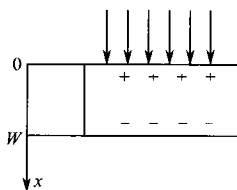



图 5-14　光照厚 n 型硅样品示意图

式中，$(\Delta p)_0$ 为表面处光注入产生的非平衡空穴浓度。

**解：** 在硅表面，光激发不断产生了电子一空穴对，然后电子一空穴向内部扩散，由于 $D_n > D_p$，所以电子比空穴扩散得快，结果在光照面（$x=0$ 处）积累了正电荷，背面（$x=W$ 处）积累负电荷，在整个体内形成了一个沿 $x$ 方向的电场 $\mathscr{E}$。这一电场阻止了扩散不均匀所引起的电荷的进一步积累。若光照恒定，体内载流子分布达到了一个稳定状态。此时电子、空穴流密度分别为

$$J_n = -D_n\frac{d(\Delta n)}{dx} - \mu_n n\mathscr{E} \tag{1}$$

$$J_p = -D_p\frac{d(\Delta p)}{dx} + \mu_p p\mathscr{E} \tag{2}$$

而总电流密度为

$$J = qJ_p - qJ_n \tag{3}$$

在开路情况下，$J=0$，故 $J_p - J_n = 0$，即

$$-D_p \frac{d(\Delta p)}{dx} + p\mu_p \mathscr{E} + D_n \frac{d(\Delta n)}{dx} + n\mu_n \mathscr{E} = 0$$

在小信号条件下，少子的漂移电流与扩散电流相比可以略去，所以第二项略去。根据准中性条件，$\Delta n \approx \Delta p$，故

$$\frac{d(\Delta p)}{dx}(D_n - D_p) + n\mu_n \mathscr{E} = 0$$

$$\mathscr{E} = -\frac{D_n - D_p}{n\mu_n} \frac{d(\Delta p)}{dx} \tag{4}$$

$$= \frac{k_0 T}{q} \frac{(\mu_n - \mu_p)}{n\mu_n} \frac{d(\Delta p)}{dx}$$

硅片正面与背面间产生的光扩散电动势差为

$$V(0) - V(W) = \int_0^W \mathscr{E}(x) dx \tag{5}$$

将式(4)代入式(5)中，可得

$$V(0) - V(W) = -\frac{k_0 T}{q} \frac{(\mu_n - \mu_p)}{n\mu_n} \int_0^W \frac{d(\Delta p)}{dx} dx$$

由边界条件，$x=0$，$\Delta p = (\Delta p)_0$；在 $x=W$，$\Delta p \approx 0$，故

$$V(0) - V(W) = \frac{k_0 T}{q} \frac{(\mu_n - \mu_p)}{n\mu_n} (\Delta p)_0 \tag{6}$$

即得证之。

**【例 5-18】** 一块掺施主浓度为 $2\times10^{16}\text{cm}^{-3}$ 的硅片，在 920℃下掺金到饱和浓度。然后经氧化等处理，最后此硅片的表面复合中心为 $10^{10}\text{cm}^{-2}$。

(1) 计算体寿命，扩散长度和表面复合速度；

(2) 如果用光照射硅片并被样品均匀吸收，电子一空穴对的产生率为 $10^{11}\text{cm}^{-3}\cdot\text{s}^{-1}$，试求表面处的空穴浓度及流向表面的空穴流密度是多少？

**解：**认为复合中心 $N_t$ 分布是均匀的，则由表面复合中心可求得：

$$N_t = 10^{15}\text{cm}^{-3}$$

(1) 体寿命
$$\tau = \frac{1}{r_p N_t}$$

已知金的空穴俘获率 $\gamma_p = 1.15\times10^{-7}\text{cm}^3/\text{s}$，$N_t = 10^{15}(\text{cm}^3)$

代入得
$$\tau = \frac{1}{1.15\times10^{-7}\times10^{15}} = 8.7\times10^{-9}(\text{s})$$

又因为迁移率 $\mu_p$ 与总的杂质浓度有关。

$$N_i = N_D + N_t = 2\times10^{16}\times10^{15} = 2.1\times10^{16}(1/\text{cm}^3)$$

由教材图 4-14 查得

$$\mu_p = 350(\text{cm}^2/\text{V}\cdot\text{s})$$

所以
$$D_p=\frac{k_0 T}{q}\mu_p=\frac{1}{40}\times 350=8.75(\text{cm}^2/\text{s})$$

故扩散长度

$$L_p= \sqrt{D_p\tau_p} = \sqrt{8.75\times 8.7\times 10^{-9}}$$
$$= 2.76\times 10^{-4}(\text{cm})$$

表面复合速度

$$s_p = \gamma_p N_{st} = 1.15\times 10^{-7}\times 10^{10} = 1.15\times 10^3(\text{cm/s})$$

(2) 因为 $p(x)=p_0+\tau_p g_p\left(1-\frac{s_p\tau_p}{L_p+s_p\tau_p}e^{-\frac{x}{L_p}}\right)$

$$p_0 = \frac{n_i^2}{n_0}$$

又因为金在 n 型 Si 中起受主作用，故

$$n_0 = N_D - N_t = 1.9\times 10^{16}(1/\text{cm}^3)$$
$$p_0 = \frac{n_i^2}{1.9\times 10^{16}} = \frac{(1.5\times 10^{10})^2}{1.9\times 10^{16}} = 1.18\times 10^4(1/\text{cm}^3)$$

且在 $x=0$ 处

$$p(0) = p_0 + \tau_p g_p\left(1-\frac{s_p\tau_p}{L_p+s_p\tau_p}\right)$$

代入数据得

$$\begin{aligned}
p(0)&= 1.18\times 10^4 + 8.7\times 10^{-9}\times 10^{17}\times \\
&\quad\left(1-\frac{1.15\times 10^3\times 8.7\times 10^{-9}}{2.76\times 10^{-4}+1.15\times 10^3\times 8.7\times 10^{-9}}\right)\\
&= 1.18\times 10^4 + 8.7\times 10^{-9}\times 10^{17}\times \\
&\quad\left(1-\frac{1.15\times 8.7\times 10^{-6}}{2.76\times 10^{-4}+1\times 10^{-5}}\right)\\
&= 1.18\times 10^4 + 8.7\times 10^8\times(1-0.035)\\
&= 1.18\times 10^4 + 8.7\times 10^8\times 0.965\\
&= 1.18\times 10^4 + 8.395\times 10^9\\
&= 8.4\times 10^8(1/\text{cm}^3)
\end{aligned}$$

故根据表面复合速度的物理意义，求得流向表面的空穴流密度为

$$J_p = s_p(p(0)-p_0)$$

代入数据得

$$J_p= 1.15\times 10^3\times(8.4\times 10^8 - 1.18\times 10^4)$$

$$= 9.66 \times 10^{11}[1/(\mathrm{cm}^2 \cdot \mathrm{s})]$$

**【例 5-19】** 若过剩载流子浓度 $\Delta n$、$\Delta p$ 与热平衡载流子浓度相比不能忽略时，就必须做电子和空穴同时扩散和漂移的双极情况处理。证明保持电中性条件下过剩电子和空穴流动的基本方程为

$$\frac{\partial(\Delta p)}{\partial t} = D^* \frac{\partial^2(\Delta p)}{\partial x^2} - \mu^* \frac{\partial(\Delta p)}{\partial x} + G - \frac{\Delta p}{\tau}$$

$$D^* = \frac{(n+p)D_n D_p}{nD_n + pD_p}$$

$$\mu^* = \frac{(n-p)\mu_n \mu_p}{n\mu_n + p\mu_p}$$

**证明：** 在非均匀的半导体中，同时存在扩散流和漂移流时，引起载流子密度的变化率为

$$\frac{\partial p}{\partial t} = D_p \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} - \mu_p \mathscr{E} \frac{\partial p}{\partial x} - p\mu_p \frac{\partial \mathscr{E}}{\partial x} - \frac{\Delta p}{\tau} + G \tag{1}$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D_p \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} - \mu_n \mathscr{E} \frac{\partial n}{\partial x} - n\mu_n \frac{\partial \mathscr{E}}{\partial x} - \frac{\Delta n}{\tau} + G \tag{2}$$

式中，$(\mu_p \mathscr{E})\partial p/\partial x$ 是漂移过程中载流子密度不均匀而引起的空穴积累，$(p\mu_p)\partial \mathscr{E}/\partial x$ 是不均匀电场中载流子漂移速度随位置发生变化而引起的空穴积累，$\Delta p/\tau$ 为单位时间单位体积中的复合率，$G$ 为过剩载流子的产生率。

在均匀样品中，平衡载流子浓度 $p_0$、$n_0$ 是常数，并不随位置 $x$ 和时间 $t$ 而变化，所以上面式子中的载流子浓度 $p$（在微分号内的）均可用过剩载流子浓度 $\Delta p = p - p_0$（或 $\Delta n = n - n_0$）来替代。于是得到

$$\begin{aligned}\frac{\partial p}{\partial t} &= \frac{\partial(\Delta p)}{\partial t} \\ &= D_p \frac{\partial^2(\Delta p)}{\partial x^2} - \mu_p \mathscr{E} \frac{\partial(\Delta p)}{\partial x} - p\mu_p \frac{\partial \mathscr{E}}{\partial x} - \frac{\Delta p}{\tau} + G\end{aligned} \tag{3}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial n}{\partial t} &= \frac{\partial(\Delta n)}{\partial t} \\ &= D_n \frac{\partial^2(\Delta n)}{\partial x^2} + \mu_p \mathscr{E} \frac{\partial(\Delta n)}{\partial x} + n\mu_n \frac{\partial \mathscr{E}}{\partial x} - \frac{\Delta n}{\tau} + G\end{aligned} \tag{4}$$

根据泊松方程

$$\frac{\partial \mathscr{E}}{\partial x} = q(\Delta p - \Delta n)/\varepsilon_{rs}\varepsilon_0 \tag{5}$$

式中，$\varepsilon_0$ 为真空电容率，$\varepsilon_{rs}$ 为材料的相对介电常数，$q(\Delta p - \Delta n)$ 为空间电荷密度。泊松方程决定了式中电场变化与电荷分布之间的关系，则

$$\frac{\partial(\Delta p)}{\partial t} = D_p \frac{\partial^2(\Delta p)}{\partial x^2} - \mu_p \mathscr{E} \frac{\partial(\Delta p)}{\partial x} - \frac{p\mu_p q}{\varepsilon_{rs}\varepsilon_0}(\Delta p - \Delta n) - \frac{\Delta p}{\tau} + G \tag{6}$$

$$\frac{\partial(\Delta n)}{\partial t} = D_n \frac{\partial^2(\Delta n)}{\partial x^2} + \mu_n \mathscr{E} \frac{\partial(\Delta n)}{\partial x} + \frac{n\mu_n q}{\varepsilon_{rs}\varepsilon_0}(\Delta p - \Delta n) - \frac{\Delta n}{\tau} + G \tag{7}$$

考虑到准中性条件，$\Delta n-\Delta p=\Delta n'$。$\Delta n'$ 与 $\Delta p$ 相比是一个很小的量。在一维情况下，设 $\tau_n=\tau_p=\tau$，将上式代入式(7)中，得到

$$\frac{\partial(\Delta p+\Delta n')}{\partial t}=D_n\frac{\partial^2(\Delta p+\Delta n')}{\partial x^2}-\frac{\mu_n nq}{\varepsilon_0\varepsilon_{rs}}\Delta n'+\mu_n\mathscr{E}\frac{\partial(\Delta p+\Delta n')}{\partial x}-\frac{\Delta p+\Delta n'}{\tau}+G$$

$\Delta n'$ 与 $\Delta p$ 相比可以略去，故

$$\frac{\partial(\Delta p)}{\partial t}-D_n\frac{\partial^2(\Delta p)}{\partial x^2}-\frac{\mu_n nq}{\varepsilon_0\varepsilon_{rs}}\Delta n'+\mu_n\mathscr{E}\frac{\partial(\Delta p)}{\partial x}-\frac{\Delta p}{\tau}+G \tag{8}$$

由于 $n\Delta n'$ 并不是一个小量，故设法消去上式中右边第二项。

将式(6)两边乘以 $n\mu_n$、式(8)乘以 $p\mu_p$，化简后得到

$$\begin{aligned}\frac{\partial(\Delta p)}{\partial t}&=\frac{\partial^2(\Delta p)}{\partial x^2}\frac{D_p\mu_n n+D_n\mu_p p}{\mu_n n+\mu_p p}+\\&\quad\frac{\partial(\Delta p)}{\partial x}\mathscr{E}\frac{\mu_p\mu_n n-\mu_n\mu_p p}{n\mu_n+p\mu_p}+G-\frac{\Delta p}{\tau}\\&=D^*\frac{\partial^2(\Delta p)}{\partial x^2}-\mu^*\mathscr{E}\frac{\partial(\Delta p)}{\partial x}+G-\frac{\Delta p}{\tau}\end{aligned} \tag{9}$$

利用爱因斯坦关系式得到双极扩散系数 $D^*$ 为

$$D^*=\frac{nD_nD_p+pD_nD_p}{nD_n+pD_p}=\frac{(n+p)D_nD_p}{nD_n+pD_p} \tag{10}$$

双极漂移迁移率为

$$\mu^*=\frac{(n-p)\mu_n\mu_p}{n\mu_n+p\mu_p} \tag{11}$$

**【例 5-20】** 利用双极扩散系数和双极漂移迁移率这一等效概念，试讨论在本征半导体和强 n 型半导体的实际应用。

**解：**(1) 本征半导体

由于 $n=p$，由例 5-19 中式(10)和式(11)式分别得到

$$D^*=\frac{2D_nD_p}{D_n+D_p}$$

$$\mu^*=0$$

这说明当两种载流子浓度相等时，漂移运动对载流子的分布是没有影响的。电子和空穴对维持样品的电中性起着同等重要的作用，$\Delta n$、$\Delta p$ 都只能因扩散而伸展，因复合而衰减。若两种载流子的扩散系数相等，则 $D^*$ 的数值恰好等于一种载流子的扩散系数。即 $n=p$，$D_n=D_p$，电中性条件得到了满足，可以把两种载流子运动看成是独立的。

(2) 强 n 型半导体

由于 $n\gg p$，从例 5-18 中式(10)和式(11)得到 $\mu^*\approx\mu_p$，$D^*\approx D_p$。这说明载流子的分布完全由少数载流子的扩散和漂移决定，即 $\Delta p$ 按少子空穴的迁移率沿着电场方向漂移，而多数载流子只能起屏蔽少子的作用，此时刻维持电中性。在半导体器件生产中，常常是

强 n 型或强 p 型的，所以在小信号条件下研究载流子分布时，通常总是只考虑少子的运动，并且直接运用电中性的条件。

**【例 5-21】** 若用吸收系数大的波长光照半导体样品时，在表面附近将产生电子一空穴对，试求因迁移率不同的两种载流子在 $x_1$ 和 $x_2$ 两点间感生的丹倍电动势

$$V_{12} = \frac{k_0 T}{q} \frac{\mu_n - \mu_p}{\mu_n + \mu_p} \ln \frac{\sigma_2}{\sigma_1}$$

式中，$\sigma_1$、$\sigma_2$ 分别为 $x_1$ 和 $x_2$ 处的电导率。

**解**：在一维情况下，电子和空穴的电流密度为

$$J_n = qn\mu_n \mathscr{E} + \mu_n k_0 T \frac{dn}{dx}$$

$$J_p = qp\mu_p \mathscr{E} - \mu_p k_0 T \frac{dp}{dx}$$

总电流密度

$$J = J_n + J_p$$
$$= q(n\mu_n + p\mu_p)\mathscr{E} + k_0 T\left(\mu_n \frac{dn}{dx} - \mu_p \frac{dp}{dx}\right)$$

电场 $\mathscr{E}$ 为内建电场。在开路条件下，$J=0$，于是感生的丹倍电场为

$$E = \frac{k_0 T}{q} \frac{\mu_n dn/dx - \mu_p dp/dx}{n\mu_n + p\mu_p}$$

作为一级近似，取 $\Delta n = \Delta p$，$dn/dx = dp/dx = d(\Delta n)/dx$。

根据电导率公式

$$\Delta\sigma = q(\mu_n + \mu_p)\Delta n$$

故

$$E = \frac{k_0 T}{q} \frac{(\mu_n - \mu_p)}{n\mu_n + p\mu_p} \frac{d(\Delta n)}{dx}$$
$$= \frac{k_0 T}{q} \frac{(\mu_n - \mu_p)}{\mu_n + \mu_p} \frac{1}{\sigma} \frac{d(\Delta\sigma)}{dx}$$

所以 $x_1$、$x_2$ 两点间感生的丹倍电动势 $V_{12}$ 为

$$V_{12} = \int_{x_1}^{x_2} E dx = \frac{k_0 T}{q} \frac{(\mu_n - \mu_p)}{(\mu_n + \mu_p)} \ln \frac{\sigma_2}{\sigma_1}$$

# 第6章　pn结

**主题词**

pn结及其形成，空间电荷区及势垒的形成，pn结接触电势差，pn结的整流特性，肖克莱方程式，势垒区产生电流、复合电流、大注入，pn电容效应（扩散电容、势垒电容），pn结的击穿效应和击穿机制，隧道结。

## 6.1　理论概要与重点分析

（1）pn结是将同种半导体材料的n型和p型两部分紧密结合在一起，在交界处形成一个结，即称为pn结。为使性能优越，一般采用合金法、扩散法、外延生长法和离子注入法等，改变其掺杂性质来实现这种“紧密接触”的。pn结是重要半导体器件，如结型晶体管及其相应的集成电路的工作核心。

设两种杂质的交界面为$x_j$，如果

$$\begin{cases} x<x_j, & N(x)=N_A \\ x>x_j, & N(x)=N_D \end{cases} \tag{6.1}$$

为突变结。在式(6.1)中，如$N_A \gg N_D$（或$N_D \gg N_A$），称为单边突变结，用$p^+n$（或$pn^+$）表示。用合金法、高表面浓度的浅结扩散法、生长法可近似获得突变结情况。

如果

$$\begin{cases} x<x_j, & N_A>N_D \\ x>x_j, & N_D>N_A \end{cases} \tag{6.2}$$

杂质有一个较宽的补偿过度阶段，为缓变结，较深的扩散法一般属此种情况。

（2）由于在结的两边两种载流子相差悬殊而发生扩散。n区中的电子流入p区，在结附近留下不可以移动的电离施主；同样p区中的空穴流入n区在结的附近留下不可移动的电离受主，形成一个n区为正，p区为负的电偶极层，产生由n区指向p区的自建电场，此电场的作用是阻止载流子进一步相互扩散。或者说产生了一个与扩散相反的载流子漂移，当两者达到平衡时，载流子通过结的净流动为零，达到平衡。建立起一个稳定的空间电荷区和一个稳定的自建电场。n型的一边带正电，电动势高；p型一边带负电，电势低，所产生电动势差称为pn结接触电动势差。这个电动势差对n型区的电子和p型区的空穴各自向对方运动都形成势垒，使整个结构在结区形成能带弯曲，其弯曲的高度称为势垒高度，它恰恰补偿了原来两边半导体中费米能级的高度差，使两边达到等高的统一费米能级。

势垒高度

$$qV_D=E_F^n-E_F^p=k_0T\ln\frac{N_DN_A}{n_i^2} \tag{6.3}$$

接触电动势差

$$V_D = \frac{k_0 T}{q} \ln \frac{N_D N_A}{n_i^2} \tag{6.4}$$

(3) pn 结上加正向电压 $V$（p 型一端接正，n 型一端接负）时，外加电压电场与内建电场的方向相反，使内建电场减弱，势垒区变窄，势垒高度由平衡时的 $qV_D$ 变为 $q(V_D - V)$。两区的费米能级分开为 $E_F^n - E_F^p = qV$。这时由内建电场引起载流子的漂移减弱，扩散相对增强。于是有一个净的扩散电流从 p 区通过结流入 n 区，这便是 pn 结的正向电流。随外加电压 $V$ 的增加，势垒高度越来越小，载流子漂移越来越小，扩散进一步增加。因此随外加正向电压的增加，正向电流迅速增大。

在 pn 结上加反向电压（p 型一端接负，n 型一端接正）时，其外加电场方向与自建电场的方向相同，使势垒由平衡时的 $qV_D$ 增高为 $q(V_D + V)$，势垒区宽度变宽，减少了多子的相互扩散，增加了少子的漂移。因此形成了一个由 n 区流向 p 区的净电流，称之为反向电流。但因少子的浓度低，而且只有扩散到势垒边界的少子才能被势垒区的强电场拉向另一边。所以反向电流很小，而且不随外加反向电压的增加而增加，达到饱和，因此称之为反向饱和电流。

这就定性地说明了 pn 结的整流效应。

(4) 要推导出 pn 结的电流电压关系，可按下面的思路得到。

在外加偏压 $V$ 下（暂时设其为正偏），pn 结势垒区的自建电场减弱，使 p 区和 n 区有少子的净注入，n 区的电子注入 p 区变成 p 区的少子，p 区的空穴注入 n 区，成为 n 区的少子，而积累在势垒区的边界。由于内部少子浓度比边界低，因此它们会从注入的边界向各自内部扩散。在忽略掉势垒区载流子的复合、产生和小注入的条件下，解两边少数载流子的稳态扩散方程，分别求出电压为 $V$ 时，在势垒边界 $x_n$ 和 $(-x_p)$ 处空穴和电子的扩散电流密度，两者相加，即得到通过 pn 结的总电流。其结果为

$$J = q\left(\frac{D_n n_{p0}}{L_n} + \frac{D_p p_{n0}}{L_p}\right)\left(e^{\frac{qV}{k_0 T}} - 1\right) = J_s\left(e^{\frac{qV}{k_0 T}} - 1\right) \tag{6.5}$$

这就是著名的肖克莱方程式。

在式(6.5)中，当 $qV \gg k_0 T$（一般为零点几伏即可）时，$e^{\frac{qV}{k_0 T}} \gg 1$，式(6.5)变为

$$J = J_s e^{\frac{qV}{k_0 T}} \tag{6.6}$$

可见 pn 结的正向电流随外加电压的增加量指数式地增加。

对 $p^+n$ 结，由于 $n_{p0} \ll p_{n0}$，式(6.5)变为

$$J = \frac{qD_p p_{n0}}{L_p}\left(e^{\frac{qV}{k_0 T}} - 1\right) \tag{6.7}$$

对 $pn^+$ 结，$n_{p0} \gg p_{n0}$，式(6.5)变为

$$J = \frac{qD_n n_{p0}}{L_n}\left(e^{\frac{qV}{k_0 T}} - 1\right) \tag{6.8}$$

实际上，式(6.5)的结果对正、反向偏压都是一致的。只不过在反向偏压时，式(6.5)中的 $V$ 为负值。

在反向偏压下，$V<0$，当 $q|V|\gg k_0T$ 时，$e^{\frac{qV}{k_0T}}\ll 1$，式(6.5)变为

$$J=-J_s=-\left(\frac{qD_n n_{p0}}{L_n}+\frac{qD_p p_{n0}}{L_p}\right) \tag{6.9}$$

为反向饱和电流密度。

肖克莱方程式是在理想 pn 结条件导出的，它揭示了 pn 结导电性质的基本原理。但实际 pn 结与它有差异，这主要表现在：① 存在表面效应；② 势垒区中有载流子的产生和复合，③ 大注入效应，④ 串联电阻效应。为了更准确地描写一个实际的 pn 结，还应对其进行必要的修正。

(5) pn 结具有电容效应，它的大小直接影响着高频应用下的整流性能。pn 结电容可分为势垒电容和扩散电容两种。

势垒电容：在正向偏压时，pn 结势垒区(空间电荷区)变窄，反向时势垒区变宽，这种由于外加电压的变化引起势垒区宽窄即空间电荷量的变化而产生的电容效应，称为势垒电容。

因为势垒区的电荷是由未被中和的电离杂质形成，因而它与 pn 结两边的杂质浓度和分布有关。按定义 $C_T=\frac{dQ}{dV}$，要求出势垒电容，应找出空间电荷区的电量 $Q$ 与外加电压 $V$ 的关系，这种关系是利用解耗尽层近似下空间电荷区的泊松方程获得。根据解的结果，可求出：

① 势垒宽度

突变结
$$x_D=\sqrt{\frac{2\varepsilon_r\varepsilon_0(N_A+N_D)(V_D-V)}{qN_AN_D}} \tag{6.10}$$

$p^+n$ 结
$$x_D\approx x_n=\sqrt{\frac{2\varepsilon_r\varepsilon_0(V_D-V)}{qN_D}} \tag{6.11}$$

$pn^+$ 结
$$x_D\approx x_p=\sqrt{\frac{2\varepsilon_r\varepsilon_0(V_D-V)}{qN_A}} \tag{6.12}$$

线性缓变结
$$x_D=\sqrt[3]{\frac{12\varepsilon_r\varepsilon_0(V_D-V)}{q\alpha_j}} \tag{6.13}$$

② 空间电荷区的总电量

突变结
$$|Q|=A\sqrt{\frac{2\varepsilon_r\varepsilon_0 qN_AN_D(V_D-V)}{N_A+N_D}} \tag{6.14}$$

$p^+n$ 或 $pn^+$ 结
$$|Q|=A\sqrt{2\varepsilon_r\varepsilon_0 qN_B(V_D-V)} \tag{6.15}$$

线性缓变结
$$|Q|=\left(\frac{Aq\alpha_j}{8}\right)\cdot\sqrt[3]{\left[\frac{12\varepsilon_r\varepsilon_0(V_D-V)}{q\alpha_j}\right]^2} \tag{6.16}$$

式中，$A$ 为 pn 结的面积，$N_B$ 为低掺杂一边的杂质浓度。

③ 势垒电容

突变结
$$C_T=A\sqrt{\frac{\varepsilon_r\varepsilon_0 qN_AN_D}{2(N_D+N_A)(V_D-V)}} \tag{6.17}$$

$p^+n$ 或 $pn^+$ 结 $$C_T = A\sqrt{\frac{\varepsilon_r\varepsilon_0 q N_B}{2(V_D - V)}} \tag{6.18}$$

线性缓变结 $$C_T = A\sqrt[3]{\frac{q\alpha_j\varepsilon_r^2\varepsilon_0^2}{12(V_D - V)}} \tag{6.19}$$

无论是突变结还是线性缓变结，其势垒电容都与一个平行板电容器的电容相似，可表达为

$$C_T = \frac{A\varepsilon_r\varepsilon_0}{x_D} \tag{6.20}$$

只是其中的板间距用相应情况下的势垒宽度 $x_D$ 所代替。反向偏压增加，势垒宽度增大，其电容量越小，因此它是一个随外加电压而变化的可变电容。

以上是通过耗尽层近似得出的结果，因而对反向 pn 结是比较精确的，而在正向电压时，由于大量载流子通过势垒区，它们对其电容有贡献，因而应进行修正。

扩散电容：在正向偏压时，由于 pn 结少子的注入，在扩散区内都有一定数量的少子和等量的多子积累，而且其浓度随正向偏压的变化而变化，这就产生了扩散电容。

通过求稳态扩散时，扩散区内积累载流子的总电量与外加电压的关系，即可得到扩散电容

$$C_D = \frac{dQ_p}{dV} + \frac{dQ_n}{dV} = Aq^2\left(\frac{n_{p0}L_n + p_{n0}L_p}{k_0 T}\right)e^{\frac{qV}{k_0 T}} \tag{6.21}$$

对 $p^+n$ 结 $$C_D = \left(\frac{Aq^2 p_{n0}L_p}{k_0 T}\right)e^{\frac{qV}{k_0 T}} \tag{6.22}$$

扩散电容随正向电压指数式增大，因此在较高的正向偏压下，扩散电容起主要作用。

(6) 当 pn 结反向偏压增大到某一数值 $V_{BR}$ 时，反向电流突然迅速增大，这时便发生了 pn 结的击穿，$V_{BR}$ 称为击穿电压。击穿电压是 pn 结质量的重要参数。发生击穿的机制主要有下列三种。

① 雪崩击穿：在较大的反向电压下，势垒区有很强的电场，通过势垒区的载流子，被高电场加速而获得很高能量，去撞击价带中的电子而产生电子—空穴对。新的电子和空穴又可被加速，去撞击价带电子，产生第二代电子—空穴对。这样雪崩式地繁衍下去，使 pn 结反向电流迅速增大而出现击穿现象，这就是雪崩击穿。显然要发生雪崩击穿，除要有高电场强度外，还必须有较大的势垒宽度。

② 隧道击穿：又称齐纳击穿，当 pn 结势垒区较薄，在足够高的反向偏压下，使势垒能带倾斜到使 n 区导带底低于 p 区价带顶时，p 区价带中的电子可以以隧道穿通的形式跨越禁带而进入 n 区导带形成隧道电流。当电压加大到使隧道概率达到一定程度时，反向电流急剧增加而发生隧道击穿。显然，高掺杂、势垒宽度小的 pn 结中易于产生这种击穿效应。

③ 热电击穿：pn 结的反向电流在结中发生热损耗，当反向电流增大时，热损耗增大使结温升高，其结果会使本征载流子浓度增高，反向电流进一步增大，如果散热条件不好，这种相互的恶性循环，很快使 pn 结发生击穿，以致毁损。

以上三种击穿,并不是完全孤立的,只不过在不同的结构和环境下,某种击穿机制起着主导作用,也可能三种情况都同时起作用,而最终发生击穿现象。

(7) 两边均为高掺杂形成的 pn 结称为隧道结。由于这种 pn 结具有正向负阻特性,制造成隧道二极管而得到广泛的应用。

隧道结正、反向的电流电压特性,可用 p、n 区价带和导带具有相同的量子态,但一边被电子占据,而另一边空着时,就能发生载流子的隧道效应,而这种相同量子态的数目越多,隧穿电流越大。相同量子态数目随外加电压变化,再结合 pn 结正向扩散电流可对隧道结电流电压特性予以定性解释。

## 6.2 概念思考与练习题

**【6-1】** 平衡 pn 结有什么特点,画出势垒区中载流子漂移运动和扩散运动的方向。

**【6-2】** 定性地画出正向偏置时 pn 结能带图;在图上标出准费米能级的位置,并与热平衡时 pn 结能带图进行比较。

**【6-3】** 如图 6-1 所示,p 型和 n 型半导体材料接触形成 pn 结,试画出热平衡时的能带图,并标明势垒高度和势垒宽度。

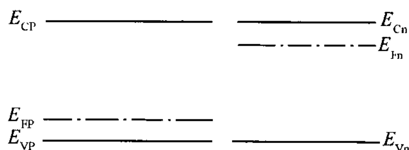



图 6-1 题 6-3 用图

**【6-4】** 平衡 pn 结既然存在有电势差,为什么又不能作为固体电池呢?

**【6-5】** pn 结结处的空间电荷层宽度的数量级是多少?这种空间电荷层由什么形成的?空间电荷区内什么位置的电场最大?

**【6-6】** 写出 pn 结电流电压方程,并说明方程中每一项的物理意义?对于较大的正向偏置和反向偏置分别写出它们的表达式说明 pn 的特性。反向电流由哪几部分构成的?在一般情况下什么是主要的?为什么反向电流和温度关系很大?

**【6-7】** 实际硅 pn 结的反向电流随反向电压增加而不饱和分析其增大的原因。

**【6-8】** 在测试 pn 结反向电流时,有光照和无光照是不一样的,试问哪种情况下数值大?为什么?

**【6-9】** 在隧道二极管中,n 区和 p 区均重掺杂使 $E_{Fn}$ 和 $E_{Fp}$ 均位于导带和价带中,画出这种二极管在零偏和反偏时的能带图,并解释隧道二极管的伏安特性曲线?

**【6-10】** 考虑一个两侧掺杂浓度相等(即 $N_A=N_D$)的突变 pn 结,画出其电荷、电场强度、电动势在反偏条件下它们随结距离 $x$ 变化的函数关系。

**【6-11】** 分别画出正、反向偏置 pn 结 n 侧少数载流子的浓度随结距离变化的函数关系曲线,指出过剩载流子浓度何处为正,何处为负?

【6-12】 说明 pn 结势垒电容和扩散电容的物理意义，分别讨论它们与电流或电压的关系。反偏 pn 结有无扩散电容？为什么？

【6-13】 区别雪崩击穿和隧道（齐纳）击穿的不同。为什么低击穿电压（$V_B<4.5V$）的 pn 结其击穿电压的温度系数是负的？而高击穿电压时却是正的？

【6-14】 为什么 pn 结的接触电位差不能通过万用表跨接在二极管两端的方法进行测量？

【6-15】 当 pn 结 n 型区的电导率远远大于 p 型区的电导率时，pn 结电流主要是空穴流还是电子流？

【6-16】 (1)说明 pn 结理想模型（即扩散模型）的基本假设。

(2)在推导 pn 结电流—电压关系时，这些基本假设体现在哪些地方？

(3)对于非理想情况应做如何修正（着重从物理角度予以说明）？

【6-17】 选择正确答案填入横线上：

(1) 在相同偏压下，单边突变 $p^+n$ 结单位面积电容量主要由______决定（n 区掺杂浓度，$p^+$ 区掺杂浓度，pn 结面积）。

(2) 在相同正向电流 $I_F$ 情况下，锗 pn 结的正向微分电阻 $r_0$ 比硅 pn 结的 $r_0$ ________，在相同正向电压 $V_F$ 情况下，锗 pn 结的 $r_0$ 比硅 pn 结的 $r_0$ ________（大，小，相同）。

(3) pn 结雪崩击穿电压随温度升高而________，pn 结的隧道击穿电压随温度升高而________（提高，降低，保持不变）。

(4) 如果略去接触电阻和体电阻，$p^+n$ 结在大注入情况下外加正向电压________，$p^+n$结在小注入情况下，外加正向电压________（只降落在势垒区，只降落在扩散区，势垒区和扩散区各降落一部分）。

(5) 若保持 pn 结上正向电压 $V_F$ 不变，且 n 区掺杂浓度和少子寿命不变，而 p 区掺杂浓度增加，则在 n 区的非平衡少子储存电荷量______，在 p 区的非平衡少子储存电荷量________（增加，减少，不变）。

【6-18】 pn 结的接触电势差 $V_D$ 有无可能超过禁带宽度 $E_g$？为什么？

【6-19】 画出整个 pn 结在均匀光照下的能带图，图上标明准费米能级 $E_F^n$ 和 $E_F^p$ 的变化（设 pn 结开路和短路两种情况）。

【6-20】 说明 $p^+n$ 结在正向偏置条件下，p 区空穴电流如何转换成 n 区电子电流。

## 6.3 典型例题解析

**【例 6-1】** 推导 pn 结自建电动势方程

$$V_D = \frac{k_0 T}{q}\ln\frac{N_A N_D}{n_i^2} \tag{1}$$

**解法一**：pn 结势垒高度正好补偿了 n 区和 p 区费米能级之差，使平衡 pn 结的费米能级处处相等，因此

$$qV_D = E_{Fn} - E_{Fp}$$

且

$$n_{n0} = n_i \exp\left(\frac{E_{Fn} - E_i}{k_0 T}\right)$$

$$n_{p0} = n_i \exp\left(\frac{E_{Fn} - E_i}{k_0 T}\right)$$

两式相除取对数，得到

$$E_{Fn} - E_{Fp} = k_0 T \ln \frac{n_{n0}}{n_{p0}}$$

由于 $n_{n0} \approx N_D$，$n_{p0} \approx n_i^2 / N_A$，则

$$V_D = \frac{1}{q}(E_{Fn} - E_{Fp}) = \frac{k_{0T}}{q} \ln \frac{N_A N_D}{n_i^2}$$

**解法二：** 在 pn 结平衡条件下，结中的净电荷为零。若考虑净空穴电流为零，则

$$J_p = -qD_p \frac{dp}{dx} + q\mu_p p\mathscr{E} = 0$$

$J_p$ 为空穴电流密度，右边第一项为扩散电流密度分量，第二项为漂移电流密度分量，内建电场为 $\mathscr{E}$。由此，空间电荷区的电场强度为

$$\mathscr{E} = \frac{D_p}{\mu_p} \frac{1}{p} \frac{dp}{dx} = \frac{k_0 T}{q} \frac{1}{P} \frac{dp}{dx}$$

将上述积分，得到内建电动势 $V_D$ 为

$$V_D = \int_p^n -\mathscr{E} dx = -\frac{k_0 T}{q} \int_{p_{p0}}^{p_{n0}} \frac{1}{p} \frac{dp}{dx} = \frac{k_0 T}{q} \ln \frac{p_{p0}}{p_{n0}}$$

所以

$$V_D = \frac{k_0 T}{q} \ln \frac{N_D N_A}{n_i^2}$$

**解法三：** 在 pn 结平衡条件下，中性区内空间电荷总密度为零，即

$$\frac{d^2 V}{dx^2} = 0$$

及

$$n_{n0} + p_{p0} - N_D + N_A = 0$$

对于 n 型中性区，$N_A = p_{p0} = 0$，$n_{n0} \gg p_{p0}$，则 $n_{n0} = N_D$。

由于

$$n_{n0} = n_i \exp(E_{Fn} / k_0 T)$$

$$E_{Fn} = k_0 T \ln \frac{n_{n0}}{n_i} = k_0 T \ln \frac{N_D}{n_i}$$

在 p 型中性区，同样得到

$$E_{Fp} = -k_0 T \ln \frac{N_A}{n_i}$$

故

$$V_D = \frac{1}{q}(E_{Fn} - E_{Fp}) = \frac{k_0 T}{q}\ln\frac{N_A N_D}{n_i^2}$$

**【例 6-2】** 已知硅的突变结两边掺杂浓度各为 $N_A=10^{16}\text{cm}^{-3}$，$N_D=10^{20}\text{cm}^{-3}$，(1) 求 pn 结势垒高度和宽度，(2) 画出电场 $\mathscr{E}(x)$和电动势 $V(x)$的分布图。设施主杂质为磷。

**解**：(1) 平衡费米能级处处相等，因而 pn 结势垒高度

$$gV_D = E_{Fn} - E_{Fp} \tag{1}$$

式中 $E_{Fn}$、$E_{Fp}$各为 n 区和 p 区的费米能级。因为 n 区和 p 区平衡电子浓度各为

$$n_{n0} = n\exp[(E_{Fn} - E_i)/k_0 T]$$
$$n_{p0} = n\exp[(E_{Fp} - E_i)/k_0 T]$$

将以上两式相除后取对数，得

$$\ln\left(\frac{n_{n0}}{n_{p0}}\right) = \frac{(E_{Fn} - E_{Fp})}{k_0 T}$$

代入式(1)，得

$$qV_D = k_0 T\ln\left(\frac{n_{n0}}{n_{p0}}\right) \tag{2}$$

在杂质全电离时，$n_{n0}\approx N_D$，$n_{p0}\approx n_i^2/N_A$，故

$$qV_D \approx k_0 T\ln(N_D N_A/n_i^2) \tag{3}$$

但本题给出的 $N_D=10^{20}\text{cm}^{-3}$，已属简并情况，室温下施主杂质不能全部电离，故势垒高度应写为

$$qV_D = k_0 T\ln(n_{n0}N_A/n_i^2) = k_0 T\ln(n_D^+ N_A/n_i^2) \tag{4}$$

室温下电离施主浓度为

$$n_D^+ = \frac{N_D}{1 + 2\exp[(E_F - E_D)/k_0 T]} = \frac{N_D}{1 + 2\exp(\Delta E/k_0 T)} \tag{5}$$

考虑简并情况：$E_F\approx E_C$（导带底），且设施主杂质为磷，其 $\Delta E=E_c-E_D=0.044\text{eV}$，由式(5)求得 $n_D^+=0.083N_D=8.3\times10^{18}\text{cm}^{-3}$，代入式(4)得 pn 结势垒高度

$$qV_D = 0.026\ln\frac{8.3\times10^{18}\times10^{16}}{(1.5\times10^{19})^2} \approx 0.87(\text{eV})$$

pn 结势垒宽度为

$$x_D \approx (2e_s\varepsilon_0 V_D/qN_A)^{1/2} \tag{6}$$
$$= \left(\frac{2\times11.8\times8.85\times10^{-12}\times0.87}{1.6\times10^{19}\times10^{22}}\right)^{1/2}$$
$$= 3.37\times10^{-7}\text{m} = 0.337(\mu\text{m})$$

(2) 设势垒区的正、负空间电荷区宽度分别为 $\delta_n$ 和 $\delta_p$，且取 $x=0$ 处为交界面，势垒区的电荷密度为 $\rho(x)$[如图 6-2(a)所示]。

则该突变 $pn^+$ 结势垒区内的泊松议程为

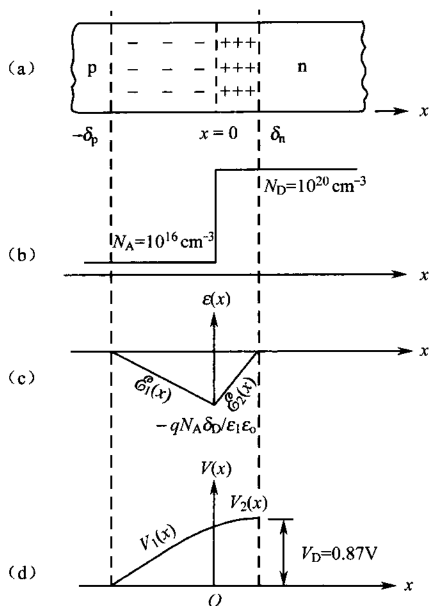



图 6-2　pn 突变结 ε(x)、V(x)分布

$$\frac{d^2V_1(x)}{dx^2}=\rho_1(x)=\frac{qN_A}{\varepsilon_r\varepsilon_0},当-\delta_p\leqslant x\leqslant 0$$

$$\frac{d^2V_2(x)}{dx^2}=\rho_2(x)=-\frac{qN_D}{\varepsilon_r\varepsilon_0},当 0\leqslant x\leqslant \delta_n \tag{7}$$

利用边界条件可解出势垒区中的电场：

$$\left.\begin{aligned}\mathscr{E}_1(X)&=-\frac{dV_1(X)}{dx}=-\frac{qN_A(X+\delta_p)}{\varepsilon_r\varepsilon_0}\\ \mathscr{E}_2(X)&=-\frac{dV_2(X)}{dX}=\frac{qN_D(X-\delta_n)}{\varepsilon_r\varepsilon_0}\end{aligned}\right\}\tag{8}$$

可见，在$-\delta_p\leqslant x\leqslant 0$ 范围内 $\mathscr{E}_1(x)$由 0 线性变化到$-qN_A\delta_p/\varepsilon_r\varepsilon_0$；在 $0\leqslant x\leqslant\delta_n$ 范围内，$\mathscr{E}_2(x)$由$-qN_A\delta_p/\varepsilon_r\varepsilon_0=-qN_D\delta_n/\varepsilon_r\varepsilon_0$ 线性变化到 0；如图 6-2(c)所示。因势垒区中正、负空间电荷总量相等，故 $N_A\delta_p=N_D\delta_u$，现 $N_D=10^{20}cm^{-3}$，$N_A=10^{16}cm^{-3}$，所以，$\delta_p\gg\delta_n$，从而 $\mathscr{E}_2(x)$比 $\mathscr{E}_1(x)$的变化陡峭得多，且势垒区主要向 p 区一侧扩展。

将式(8)积分，得势垒区各点电动势为

$$V_1(x)=\frac{qN_A(x^2+\delta_p^2)}{2\varepsilon_r\varepsilon_0}+\frac{qN_A\delta_p x}{\varepsilon_r\varepsilon_0},\quad -\delta_p<x<0$$

$$V_2(x)=V_D-\frac{qN_D(x^2+\delta_n^2)}{2\varepsilon_r\varepsilon_0}-\frac{qN_D\delta_n x}{\varepsilon_r\varepsilon_0},\quad 0<x<\delta_n$$

可见，当 $x=-\delta_p$ 时，$V_1(-\delta_p)=0$；当 $x=0$ 时，$V_1(0)=qN_A\delta_p^2/2\varepsilon_r\varepsilon_0$。当 $x=0$ 时，$V_2(0)=V_D-qN_D\delta_n^2/2\varepsilon_r\varepsilon_0=V_1(0)$；当 $x=\delta_n$ 时，$V_2(\delta_n)=V_D$；在垒区内电动势 $V(x)$呈抛物线分布，如图 6-2(d)所示

**【例 6-3】** 有锗 pn 结，设 p 区的掺杂浓度为 $N_A$，n 区掺杂浓度为 $N_D$，已知 $N_D=10^2N_A$，而 $N_A$ 相当于 $10^8$ 个锗原子中有一个受主原子，计算室温下接触电位差 $V_D$。若 $N_A$ 浓度保持不变，而 $N_D$ 增加 $10^2$ 倍，试求接触电位差的改变。

**解：**(1) 已知锗原子的浓度为 $4.4\times10^{22}(1/cm^3)$

因为

$$N_A=4.4\times10^{22}\times10^{-8}=4.4\times10^{14}(1/cm^3)$$

$$N_D=4.4\times10^{14}\times10^2=4.4\times10^{16}(1/cm^3)$$

故

$$V_D=\frac{k_0T}{q}\ln\frac{N_DN_A}{n_i^2}=0.026\ln\frac{4.4\times10^{14}\times4.4\times10^6}{(2.5\times10^{13})^2}$$

$$=0.026\times10.34=0.268(V)$$

(2) 设 $N_{D1}$时对应的接触电动势差为 $V_{D1}$

$$V_{D1} = \frac{k_0 T}{q} \ln \frac{N_A N_{D1}}{n_i^2}$$

设 $N_{D2}$时对应的接触电动势差为 $V_{D2}$

$$V_{D2} = \frac{k_0 T}{q} \ln \frac{N_A N_{D2}}{n_i^2}$$

则

$$V_{D2} - V_{D1} = \frac{k_0 T}{q} \left( \ln \frac{N_A N_{D2}}{n_i^2} - \ln \frac{N_A N_{D1}}{n_i^2} \right)$$

$$= \frac{k_0 T}{q} \ln \frac{N_{D2}}{N_{D1}} = 0.12(\mathrm{V})$$

**【例 6-4】** 由电阻率为 1Ω・cm 的 p 型锗和 0.1Ω・cm 的 n 型锗半导体组成一个 pn 结，计算在室温(300K)时，内建电位差 $V_D$ 和阻挡层宽度。已知在上述电阻率下，p 区的空穴迁移率 $\mu_p = 1650\mathrm{cm^2/(V \cdot s)}$，n 区电子的迁移率 $\mu_n = 3000\mathrm{cm^2/(V \cdot s)}$，锗的本征载流子浓度 $n_i = 2.5 \times 10^{13}\mathrm{cm^{-3}}$。

**解:** (1) 在 p 型区:

$$p_{p0} \approx N_A = \frac{1}{q\mu_p \rho_p}$$

$$= \frac{1}{1.6 \times 10^{-19} \times 1650 \times 1} = 3.8 \times 10^{15}(1/\mathrm{cm^3})$$

在 n 型区:

$$n_{n0} = N_D = \frac{1}{q\mu_n \rho_n} = \frac{1}{1.6 \times 10^{-19} \times 3000 \times 0.1}$$

$$= 2.1 \times 10^{16}(1/\mathrm{cm^3})$$

所以内建电位差

$$V_D = \frac{k_0 T}{q} \ln \frac{n_{n0} p_{p0}}{n_i^2} = 0.026 \ln \frac{2.1 \times 10^{16} \times 3.8 \times 10^{15}}{(2.5 \times 10^{13})^2}$$

$$= 0.306(\mathrm{V}) = 306(\mathrm{mV})$$

(2) 阻挡层宽度

$$x_p = \left[ \frac{2\varepsilon V_D}{q N_A \left( 1 + \frac{N_A}{N_D} \right)} \right]^{\frac{1}{2}}$$

式中，$\varepsilon = \varepsilon_0 \varepsilon_r$，$\varepsilon_0 = 8.85 \times 10^{-12}\mathrm{F/m}$，$\varepsilon_r = 16$。所以

$$x_p = \left[ \frac{2 \times 16 \times 8.85 \times 10^{-12} \times 10^{-2} \times 306}{1.6 \times 10^{-19} \times 3.8 \times 10^{15} \times (1 + 0.183)} \right]^{\frac{1}{2}}$$

$$= 3.45 \times 10^{-5}(\mathrm{cm})$$

同理

$$x_n = \left[ \frac{26 V_D}{q N_D \left( 1 + \frac{N_D}{N_A} \right)} \right]^{\frac{1}{2}}$$

$$=\left[\frac{2\times16\times8.85\times10^{-12}\times10^{-2}\times0.306}{1.6\times10^{-19}\times2.1\times10^{16}\times(1+5.53)}\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$=6.25\times10^{-6}(\text{cm})$$

阻挡层宽度 $x=x_n+x_p=6.25\times10^{-6}+3.45\times10^{-5}$

$$=4.08\times10^{-6}(\text{cm})$$

**【例 6-5】** 证明反向饱和电流公式

$$I_{c0}=Aq\left(\frac{D_n n_{p0}}{L_n}+\frac{D_p p_{n0}}{L_p}\right)$$

可以改写为

$$I_{c0}=\frac{b\sigma_i^2}{(1+b)^2}\frac{k_0T}{q}A\left(\frac{1}{\sigma_n L_p}+\frac{1}{\sigma_p L_n}\right)$$

式中,$b=\mu_n/\mu_p$,$\sigma_n$、$\sigma_p$ 分别为 n 型、p 型半导体电导率,$\sigma_i$ 为本征半导体的电导率。

**证明:** 按题意

$$I_{c0}=Ap\left(\frac{D_n n_{p0}}{L_n}+\frac{D_p p_{n0}}{L_p}\right)$$

将爱因斯坦关系式 $D/\mu=k_0T/q$ 和 $n_{p0}=n_i^2/N_A$,$p_{n0}=n_i^2/N_D$ 代入

$$I_{c0}=Ak_0Tn_i^2\left[\frac{\mu_n}{L_nN_A}+\frac{\mu_p}{L_pN_D}\right]$$

由前面电导率公式

$$\sigma_i=n_iq(\mu_n+\mu_p)$$

$$\sigma_n=n\mu_nq,\sigma_p=p\mu_pq$$

代入后得

$$I_{c0}=A\frac{k_0T}{q}\sigma_i^2\frac{\mu_n\mu_p}{(\mu_n+\mu_p)^2}\left[\frac{1}{\sigma_pL_n}+\frac{1}{\sigma_nL_p}\right]$$

$$=A\frac{k_0T}{q}\sigma_i^2\frac{b}{\frac{(\mu_n+\mu_p)^2}{\mu_p^2}}\left[\frac{1}{\sigma_pL_n}+\frac{1}{\sigma_nL_p}\right]$$

$$=A\frac{b\sigma_{2i}}{(1+b)^2}\frac{k_0T}{q}\left[\frac{1}{\sigma_nL_p}+\frac{1}{\sigma_pL_n}\right]$$

**【例 6-6】** 已知一个硅突变结,其两边的电阻率分别为 $\rho_n=10\Omega\cdot\text{cm}$ 的 n-Si 和电阻率为 $\rho_p=0.01\Omega\cdot\text{cm}$ 的 p-Si,已知其 $\mu_n=100\text{cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$,$\mu_p=300\text{cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$,试求其在室温下势垒高度和势垒宽度。

**解:** (1) 求 p 区、n 区多子浓度

$$n_{n0}=N_D=\frac{1}{\rho_nq\mu_n}=\frac{1}{10\times1.6\times10^{-19}\times1000}$$

$$=6.3\times10^{14}(1/\text{cm}^3)$$

$$p_{p0}=N_A=\frac{1}{\rho_pq\mu_p}=\frac{1}{0.01\times1.6\times10^{-19}\times300}$$

$$= 2.1 \times 10^{18} (1/\text{cm}^3)$$

(2) 势垒高度

$$qV_D = k_0 T \ln \frac{N_A N_D}{n_i^2}$$

$$= 0.026 \ln \frac{2.1 \times 10^{18} \times 6.3 \times 10^{14}}{(1.5 \times 10^{10})^2}$$

$$= 0.76 (\text{eV})$$

(3) 势垒宽度

对于 $p^+n$ 结，$N_D \ll N_A$，$x_p \ll x_n$，故总势垒宽度 $x_D \approx x_n$，即

$$x_n = \left(\frac{2\varepsilon_0 \varepsilon_{rs}}{qN_D} V_D\right)^{\frac{1}{2}} = \left(\frac{2 \times 8.85 \times 10^{-14} \times 11.9}{1.6 \times 10^{-19} \times 6.3 \times 10^{14}} \times 0.76\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$= 1.26 \times 10^{-4} (\text{cm})$$

**【例 6-7】** 若设一个硅突变结，其两边杂质浓度分别为 $N_A = 10^{17}/\text{cm}^3$，$N_D = 4.5 \times 10^{15}/\text{cm}^3$，求其势垒高度和 $x_D$、$x_n$、$x_p$ 的值。若结上加 10V 反偏电压时，求 $x_D$ 值。

**解**：(1) 求无外电压时的势垒宽度：

由式(7.1)求 $V_D$ 得

$$V_D = \frac{kT}{q} \ln \frac{N_A N_D}{n_i^2} = 0.026 \ln \frac{10^{17} \times 4.5 \times 10^{15}}{(1.5 \times 10^{10})^2}$$

$$= 0.736 (\text{V})$$

$$x_D = \left(\frac{2\varepsilon_0 \varepsilon_{rs}}{q} \frac{N_A + N_D}{N_A N_D} V_D\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$= \left(\frac{2 \times 8.85 \times 10^{-14} \times 11.9}{1.6 \times 10^{-19}} \frac{104.5 \times 10^{15}}{4.5 \times 10^{15} \times 10^{17}} \times 0.736\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$= 4.74 \times 10^{-5} (\text{cm})$$

对于一般突变结有

$$x_n = \left[\frac{2\varepsilon_0 \varepsilon_{rs}}{q} \frac{N_A}{N_D (N_A + N_D)} - V_D\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$= \left[\frac{2 \times 8.85 \times 10^{-14} \times 11.9 \times 10^{17} \times 0.736}{1.6 \times 10^{-19} \times 4.5 \times 10^{15} (4.5 \times 10^{15} + 10^{17})}\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$= 4.45 \times 10^{-5} (\text{cm})$$

同样代入数据后可得

$$x_p = \left[\frac{2\varepsilon_0 \varepsilon_{rs}}{q} \frac{N_A}{N_A (N_A + N_D)} V_D\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$= 2.04 \times 10^{-6} (\text{cm})$$

也可以用下述两式进行计算

$$x_n = \frac{N_A}{N_D + N_A} x_D = \frac{10^{17}}{4.5 \times 10^{15} + 10^{17}} \times 4.47 \times 10^{\ 5}$$

$$= 4.54 \times 10^{-5}(\text{cm})$$

$$x_p = \frac{N_D}{N_D + N_A} x_D = 2.04 \times 10^{-6}(\text{cm})$$

(2) 求有反偏电压 $V_R = 10\text{V}$ 时的 $x_D$：

对于一般突变结有

$$x_D = \left[\frac{2\varepsilon_0\varepsilon_{rs}(N_A + N_D)(V_D - V)}{qN_A N_D}\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$= \left[\frac{2 \times 8.85 \times 10^{-14} \times 11.9(10^{17} + 4.5 \times 10^{15})(0.736 + 10)}{1.6 \times 10^{-19} \times 10^{17} \times 4.5 \times 10^{15}}\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$= 1.812 \times 10^{-4}(\text{cm})$$

上式中，外加电压为 $V$ 时，结上总电压为 $(V_D - V)$，正向时 $V>0$，反向时 $V<0$。

**【例 6-8】** 有硅 pn 结，p 区和 n 区的掺杂浓度分别为 $N_A = 9\times10^{15}\text{cm}^{-3}$ 和 $N_D = 2\times10^{16}\text{cm}^{-3}$；p 区中的空穴和电子迁移率分别为 $350\text{cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$ 和 $500\text{cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$，n 区中空穴和电子迁移率分别为 $300\text{cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$ 和 $900\text{cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$；设两区内非平衡载流子的寿命为 $1\mu\text{s}$，pn 结截面积为 $10^{-2}\text{cm}^2$；$\frac{q}{k_0T} = 38.7\left(\frac{1}{V}\right)$。当外加正向电压 $V_F = 0.65\text{V}$ 时，试求：

(1) 在 300K 时流过 pn 结的电流 $I$ 表达式；

(2) 假设以 p 区指向 n 区为 $x$ 轴的正方向，列出 n 区内空穴和电子浓度分布的表达式；

(3) 确定 n 区内空穴扩散电流，电子扩散电流，电子漂移电流和总的电子电流随 $x$ 变化的表达式。

**解**：(1) 求流过 pn 结的电流 $I$ 的表达式：

(i) 首先根据爱因斯坦关系式求出 n 区空穴和 p 区电子的扩散关系，即

$$D_p = \frac{k_0T}{q}\mu_p = \frac{300}{38.7} = 7.75(\text{cm}^2/\text{s})$$

$$D_n = \frac{k_0T}{q}\mu_n = \frac{500}{38.7} = 12.9(\text{cm}^2/\text{s})$$

(ii) 空穴和电子的扩散长度

$$L_p = \sqrt{D_p\tau_p} = \sqrt{7.75 \times 1 \times 10^{-6}}$$

$$= 2.78 \times 10^3(\text{cm})$$

$$L_n = \sqrt{D_n\tau_n} = \sqrt{12.9 \times 10^{-6}}$$

$$= 3.59 \times 10^{-3}(\text{cm})$$

(iii) 热平衡时少子浓度：设 $n_i = 1.5\times10^{10}\text{cm}^{-3}$，有

$$p_{n0} = \frac{n_i^2}{N_D} = \frac{(1.5 \times 10^{10})^2}{2 \times 10^{16}} = 1.1 \times 10^4(1/\text{cm}^3)$$

$$n_{p0} = \frac{n_i^2}{N_A} = \frac{(1.5 \times 10^{10})^2}{9 \times 10^{16}} = 2.5 \times 10^3(1/\text{cm}^3)$$

(iv) 反向饱和电流

$$I_s = qA\left(\frac{D_p p_{n0}}{L_p} + \frac{D_n n_{p0}}{L_n}\right)$$

代入有关数据

$$I_S = 1.6\times10^{-19}\times10^{-2}\left(\frac{7.75\times10^{11}\times10^4}{2.78\times10^{-3}} + \frac{12.9\times2.5\times10^3}{3.59\times10^{-3}}\right)$$
$$= 6.27\times10^{-14}(\text{A})$$

所以流过 pn 结的电流 $I$ 表达式写成

$$I = I_S(e^{\frac{qV}{k_0T}} - 1) = 6.27\times10^{-14}(e^{38.2u} - 1)(\text{A})$$

当 $V_F$=0.65V 时，

$$I = 6.27\times10^{-14}\times8.4\times10^{10} = 5.27\times10^{-13}(\text{A})$$
$$= 5.27(\text{mA})$$

(2) 当 $V_F$=0.65V 时，n 区内空穴浓度分布为

$$p_n(x) = p_{n0}(e^{\frac{qV}{k_0T}} - 1)e^{-\frac{x}{L_p}} + p_{n0}$$

略去式中 1，得

$$p_n(x) = p_{n0}(e^{\frac{qV}{k_0T}})\cdot e^{-\frac{x}{L_p}} + p_{n0}$$
$$= 1.1\times10^4\times e^{38.7\times0.65}\times e^{-\frac{x}{2.78\times10^{-3}}} + 1.1\times10^4$$
$$= 9.25\times10^{14}e^{-357x} + 1.1\times10^4(1/\text{cm}^3)$$

同理求得：

$$n_n = n_{n0} + \Delta n = 2\times10^{16} + 9.25\times10^{14}e^{-357x}(1/\text{cm}^3)$$

(3) 求总电流

(i) 空穴扩散电流 $I_{pD}$

$$I_{pD} = -AqD_p\frac{dp}{dx}$$
$$= -10^{-2}\times1.6\times10^{-19}\times7.75\times9.25\times10^{14}\times(357)e^{-357x}$$
$$= 4.09\times10^3e^{-357x}(\text{A}) = 4.09e^{-357x}(\text{mA})$$

(ii) 电子扩散电流 $I_{nD}$

$$I_{nD} = AqD'_n\frac{dn}{dx}$$

$$D'_n = \frac{k_0 I}{q}\mu_n = \frac{900}{38.7} = 23.25(\text{cm}^2/\text{s})$$

所以 $$I_{nD} = 10^{-2}\times1.6\times10^{-19}\times23.25\times9.25\times10^{14}(357)e^{-357x}$$
$$= -12.28\times10^{-3}e^{-357x}(\text{A})$$

式中，负号表示电流方向和 $x$ 方向相反。

(iii) 电子漂移电流 $I_{nt}$

由于 n 区内总电流 $I$ 包括空穴扩散电流 $I_D$，电子扩散电流 $I_{nD}$，空穴漂移电流 $I_{pt}$ 和电

子漂移电流 $I_{nt}$，共有四个分量。其中由于注入的空穴浓度远小于电子浓度，空穴漂移电流可以忽略不计。在 n 区一侧存在有两个电场 $E$ 和 $E'$，$E$ 是外加正向电压时，流过 n 区的电流在 n 区体电阻上产生压降所引起的，$E'$是由于电子比空穴扩散得快而产生的一个由 p 区指向 n 区的电场。电场 $E'$使 n 区中空穴加速运动，对多子电子的扩散起着阻碍作用。根据总电流

$$I = I_{pD} + I_{nD} + I_{nt}$$

所以有

$$I_{nt} = I - I_{nD} - I_{pD} = 5.27 - 4.09e^{357x} + 12.28e^{-357x}$$
$$= 5.27 + 8.2e^{-357x}(\text{mA})$$

总的电子电流为电子漂移电流和电子扩散电流之和，即

$$I_n = I_{nt} + I_{nD} = 5.27 - 4.09e^{-357x}(\text{mA})$$

**【例 6-9】** 设硅的线性缓变结的杂质浓度梯度 $\alpha_j$ 为 $10^{22}/\text{cm}^4$，$V_D = 0.68\text{V}$，(1) 求其势垒宽度 $x_D$ 值及其最大电场，(2)求外加 10V 反偏时的 $x_D$ 值。

**解：** 线性缓变结的势垒宽度公式为

$$x_D = \left(\frac{12\varepsilon_0\varepsilon_{rs}V_D}{1\alpha_j}\right)^{\frac{1}{3}}$$
$$= \left(\frac{12\times 8.85\times 10^{-14}\times 11.9}{1.6\times 10^{-19}\times 10^{22}}\times 0.68\right)^{\frac{1}{3}}$$
$$= 1.75\times 10^{-5}(\text{cm})$$

最大电场公式

$$E_{max} = -\frac{q\,\alpha_j x_D^2}{8\varepsilon_0\varepsilon_{rs}}$$

$$E_{max} = -\frac{1.6\times 10^{-19}\times 10^{22}\times(1.75\times 10^{-5})^2}{8\times 8.85\times 10^{-14}\times 11.9}$$
$$= -5.82\times 10^4(\text{V/cm})$$

线性缓变结加外电压时 $x_D$ 的公式

$$x_D = \left[\frac{12\varepsilon_0\varepsilon_{rs}(V_D - V)}{q\,\alpha_j}\right]^{\frac{1}{3}}$$

式中，外加电压为正偏时，$V>0$；外加电压为反偏时，$V<0$，且有

$$x_D = \left[\frac{12\times 8.85\times 10^{-14}\times 11.9\times 10.68}{1.6\times 10^{-19}\times 10^{22}}\right]^{\frac{1}{3}}$$
$$= 4.39\times 10^{-5}(\text{cm})$$

**【例 6-10】** 对于一只硅的 $n^+p$ 结，若 $x_p = 0.2\mu\text{m}$，$L_n = 200\mu\text{m}$，$N_A = 10^{15}\text{cm}^{-3}$，$n_i = 1.5\times 10^{10}\text{cm}^{-3}$，求室温时、80℃时，在多大电压下势垒复合电流为主？

**解：** 对于 $n^+p$ 结，正向时势垒复合电流和扩散电流之比为

$$\frac{I_r}{I_{FD}} = \frac{x_p N_A}{2L_n n_i}\exp\left[-\frac{qV}{2k_0T}\right]$$

若设 $I_r = I_{FD}$，由式得

$$\ln\frac{x_p N_A}{2L_n n_i} = \frac{qV}{2k_0 T}$$

$$V = \frac{2k_0 T}{q}\left[\ln\frac{x_p N_A}{2L_n n_i}\right]$$

代入已知数据后

$$V = 8.4\frac{k_0 T}{q}$$

若 $T=300\text{K}$ 时，有

$$V = 0.22\text{V}$$

若 $T=353\text{K}$ 时，有

$$V = 0.26\text{V}$$

以 $T=300\text{K}$ 时讨论：

当 $V=0.22\text{V}$ 时，$I_r = I_{FD}$；当 $V<0.22\text{V}$ 时，$I_r > I_{FD}$；当 $V>0.22\text{V}$ 时，$I_r < I_{FD}$。

因此，在低正向偏压时，势垒复合电流为主要因素，在较高正向偏压时，扩散电流是主要的。

**【例 6-11】** 测得 GaP 材料制成的 $p^+n$ 结的势垒电容 $C_T$ 和反向电压 $V_R$ 的关系如下

| $V_R$(V) | 0 | 0.5 | 1 | 1.5 | 2 | 2.5 | 3 |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $C_T$(pF) | 20 | 17.3 | 15.6 | 14.3 | 13.3 | 12.4 | 11.6 |

pn 结面积 $A=4\times10^{-4}\text{cm}^2$，试求该 $p^+n$ 结的内建电场 $V_D$ 和 $N_D$。

**解**：对于 $p^+n$ 结，$N_A \gg N_D$，有

$$C_T = A\left(\frac{q\varepsilon_0\varepsilon_{rs}N_D}{2}\right)^{\frac{1}{2}}(V_D - V)^{-\frac{1}{2}} \tag{1}$$

设 $B=A\left(\frac{q\varepsilon_0\varepsilon_{rs}N_D}{2}\right)^{\frac{1}{2}}$，则

$$C_T = B(V_D - V)^{-\frac{1}{2}} \tag{2}$$

将 $V_R=0, C_T=20\text{pF}; V_R=1, C_T=15.6\text{pF}$ 代入上式，即得到

$$\left(\frac{15.6}{20}\right)^2(V_D+1) = V_D$$

$$V_D = 1.55\text{V}$$

由式(1)变换后可成为

$$N_D = \frac{2B^2}{A^2 q\varepsilon_0\varepsilon_{rs}}$$

$$= \frac{2\times(24.9\times10^{-9})^2}{4\times10^{-4}\times1.6\times10^{-19}\times8.85\times10^{-14}\times11.1}$$

$$= 1.7\times10^{20}(1/\text{cm}^3)$$

**【例 6-12】** 在给定的电流密度下，导出 pn 结正向电压和温度的函数关系。

**解:** 由肖克莱方程可得正向偏置时电流—电压方程式

$$J_F = J_S\left[\exp\left(\frac{qV_F}{k_0 T}\right) - 1\right] \tag{1}$$

式中 $J_F$、$V_F$ 分别表示正向电流和正向电压。式(1)对温度 $T$ 求导后得下列关系

$$V_F = \frac{k_0 T}{q}\ln\frac{J_F}{J_S}$$

$$\left.\frac{dV_F}{dT}\right|_{J_F=\text{常数}} = \frac{V_F}{T} - \frac{k_0 T}{qJ_S}\frac{dJ_S}{dT} \tag{2}$$

$$J_S = \frac{qD_n n_{p0}}{L_n} + \frac{qD_p p_{n0}}{L_P} = qn_i^2\left(\frac{D_n}{L_n N_A} + \frac{D_P}{L_P N_D}\right) \tag{3}$$

式(3)中,$n_i^2 = N_c N_v \exp\left(-\frac{E_g}{k_0 T}\right)$,$N_c = 2(2\pi m_n^* k_0 T)^{\frac{3}{2}}/h^3$,$N_v = 2(2\pi m_p^* k_0 T)^{\frac{3}{2}}/h^3$ 故

$$n_i^2 = C_1 T^3 \exp\left(-\frac{E_g}{k_0 T}\right) \tag{4}$$

式中 $C_1$ 为常数,由上式可得

$$J_S = C_2 T^3 \exp\left(-\frac{E_g}{k_0 T}\right) \tag{5}$$

将式(5)代入式(2)中

$$\frac{dV_F}{dT} = \frac{V_F}{T} - \frac{3k_0}{q} - \frac{E_g}{qT} \tag{6}$$

略去式(6)中常数项$\frac{3k_0}{q}$,可得

$$\left.\frac{dV_F}{dT}\right|_{J_F=\text{常数}} = \frac{V_F - E_g/q}{T} \tag{7}$$

由式(7)可见,正向电压随温度上升而线性下降,其温度系数为负。

**【例 6-13】** 一个 pn 结二极管具有下列参数:$N_D = 10^{16}\,\text{cm}^{-3}$,$N_A = 5\times10^{18}\,\text{cm}^{-3}$,$\tau_n = \tau_p = 1\mu\text{s}$,$A = 0.01\text{cm}^2$。设该结两边的宽度远大于各自少数载流子的扩散长度。试求室温(300K)时正向电流为 1mA 时的外加电压。设 p 型区的电子迁移率 $\mu_n = 500\text{cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$,n 型区的空穴迁移率 $\mu_p = 180\text{cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$。

**解:** 根据爱因斯坦关系式,求得扩散系数为

$$D_p = \frac{k_0 T}{q}\mu_p = 0.026\times500 = 13(\text{cm}^2/\text{s})$$

$$D_n = \frac{k_0 T}{q}\mu_n = 0.026\times180 = 4.7(\text{cm}^2/\text{s})$$

扩散长度为

$$L_p = \sqrt{\tau_p D_p} = 3.6\times10^{-3}(\text{cm})$$

$$L_n = \sqrt{\tau_n D_n} = 2.2\times10^{-3}(\text{cm})$$

少子浓度为

$$p_{n0}=\frac{n_i^2}{N_D}=\frac{(1.5\times10^{10})^2}{10^{16}}=2.25\times10^4(1/\text{cm}^3)$$

$$n_{p0}=\frac{n_i^2}{N_D}=\frac{(1.5\times10^{10})^2}{5\times10^{18}}=45(1/\text{cm}^3)$$

$$I_0=qA\left(\frac{D_p p_{n0}}{L_p}+\frac{D_n n_{p0}}{L_n}\right)$$

$$=1.6\times10^{-19}\times0.01\times\left(\frac{13\times2.25\times10^4}{3.6\times10^{-3}}+\frac{4.7\times45}{2.2\times10^{-3}}\right)$$

$$=1.3\times10^{-13}(\text{A})$$

由电流—电压方程 $I=I_0(e^{\frac{V}{V_T}}-1)$得

$$V=V_T\ln\left(\frac{I}{I_0}+1\right)=26\ln\left(\frac{10^{-3}}{1.3\times10^{-13}}+1\right)=610(\text{mV})$$

**【例 6-14】** 一个 pn 结二极管作为压控电容(变容管)使用,在反向偏置电压为 2V 时,它的可变电容量为 200pF,试问需要加多大的反偏电压,才能使它的电容减小到 100pF? 假设接触电位是 0.85V。

**解:** 一个突变结的势垒电容 $C_T$ 为

$$C_T=A\left[\frac{\varepsilon_r\varepsilon_0 qN_AN_D}{2(N_A+N_D)}\right]\cdot(V_D-V)^{-\frac{1}{2}}(\text{F/m}^2)$$

式中,$V_D$ 为接触电位;$V$ 为外加电压;$N_A$、$N_D$ 分别为结两边掺杂浓度。因此对于特定的二极管有

$$C_T=\frac{k}{(V_D-V)^{\frac{1}{2}}}$$

当 $V=-2$V 时,$C_T=200$pF,所以

$$k=C_T(V_D-V)^{\frac{1}{2}}=200\times10^{-12}\times(0.85+2)^{\frac{1}{2}}=3.38\times10^{-10}$$

故当 $C_T=100$pF 时

$$(V_D-V)^{\frac{1}{2}}=\frac{k}{C_T}=\frac{3.38\times10^{-10}}{100\times10^{-12}}$$

所以

$$V=10.6(\text{V})$$

**【例 6-15】** 试说明利用微分电容—电压法测量外延层杂质纵向分布的原理。

**解:** 一般来讲外延层中杂质的分布是不均匀的,利用微分电容—电压技术可测得杂质的纵向分布。我们知道对掺有施主杂质的单边突变结,单位面积上的电荷为

$$Q=qN_D\left[\frac{2\varepsilon_0\varepsilon_r}{qN_D}(V_D\pm V_{外})\right]^{\frac{1}{2}}$$

$V_D$ 是内建电势,正、负号分别对应反向、正向偏压。

单位结面积的势垒电容为

$$C_T=\frac{dQ}{dV}=\left[\frac{\varepsilon_0\varepsilon_r qN_D}{2(V_0\pm V_{外})}\right]^{\frac{1}{2}}=\frac{\varepsilon_0\varepsilon_r}{\delta}\tag{1}$$

或

$$V_D + V_外 = \frac{\varepsilon_0 \varepsilon_r q N_D}{2} C_T^{-2}$$

从上式可得

$$\frac{dV_外}{dC_T} = -\varepsilon_0 \varepsilon_r q N_D C_T^{-3}$$

于是

$$N_D = \frac{C_T^3}{\varepsilon_0 \varepsilon_r q}\left(-\frac{dC_T}{dV_外}\right)^{-1}$$

如果结的直径为 $d$，总电容为 $C$，则

$$N_D = \frac{16C^3}{\pi^2 \varepsilon_0 \varepsilon_r q d^4}\left(-\frac{dC}{dV_外}\right)^{-1} \tag{2}$$

式(2)中 $N_D$ 为距离外延层表面 $\delta$ 深处的杂质浓度。另外由式(1)可得

$$\delta = \frac{\pi \varepsilon_0 \varepsilon_r d^2}{4C} \tag{3}$$

**【例 6-16】** 电子越过禁带的隧道过程与质点穿过势垒的过程本质上相同，可用量子力学中的 WKB 近似来分析。

（1）试证电子的隧道穿透概率为

$$P = \exp\left\{-4\pi\left(\frac{2m_n^*}{h^2}\right)^{\frac{1}{2}} \int_{x_1}^{x_2} [V(x) - E]^{\frac{1}{2}} dx\right\}$$

式中 $m_n^*$ 是电子有效质量，$x_1$、$x_2$ 为势垒边界，$V(x)$是 $x$ 处势垒高度。

（2）导出图 6-3 所示三种特殊势垒的隧道穿透概率。

（3）按图 6-3(a)所示三角形势垒计算砷化镓 pn 结的电子隧穿概率。已知 $E_g = 1.35\text{eV}$，$m_n^* = 0.68m_c$，$\Delta x = 40\text{Å}$。

**证明：**（1）势垒中电子波函数 $\psi(x)$满足的定态薛定谔方程为

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m_n^*}{\hbar^2}[E - V(x)]\psi(x) = 0 \tag{1}$$

因 $\psi(x)$在势垒中随 $x$ 而衰减，故可令 $\psi(x) = e^{\Phi(x)}$，代入式(1)得

$$\frac{d^2\Phi(x)}{dx^2} + \left[\frac{d\Phi(x)}{dx}\right]^2 + \frac{2m_n^*}{\hbar^2}[E - V(x)] = 0 \tag{2}$$

一旦 $\Phi(x)$已知，则电子穿透势垒的概率 $P$ 可写为

$$P = \left|\frac{\psi(x_2)}{\psi(x_1)}\right|^2 = e^{2[\Phi(x_2) - \Phi(x_1)]} \tag{3}$$

式中，$x_1$、$x_2$ 是隧道势垒的边界。因 $\psi(x) = e^{\Phi(x)}$，故 $\Phi(x) = \ln\psi(x)$，把 $\psi$ 随 $x$ 的快变化换成了 $\Phi(x)$随 $x$ 的慢变化，而慢变函数的高阶导数趋于很低的值，故可设 $d^2\Phi(x)/dx^2 \ll [d\Phi(x)/dx]^2$，因而式(2)中 $d^2\Phi(x)/dx^2$ 可忽略，近似地有

$$\frac{d\Phi(x)}{dx} \approx -\left(\frac{2m_n^*}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}} [V(x) - E]^{\frac{1}{2}} \tag{4}$$

从 $x_1$ 到 $x_2$ 积分此式，得

$$\Phi(x_2)-\Phi(x_1)=-\left(\frac{2m_n^*}{h^2}\right)^{\frac{1}{2}}\int_{x_1}^{x_2}[V(x)-E]^{\frac{1}{2}}\mathrm{d}x \tag{5}$$

将式(5)代入式(3)即得

$$P=\exp\left\{-4\pi\left(\frac{2m_n^*}{h^2}\right)^{1/2}\int_{x_1}^{x_2}[V(x)-E]^{\frac{1}{2}}\mathrm{d}x\right\} \tag{6}$$

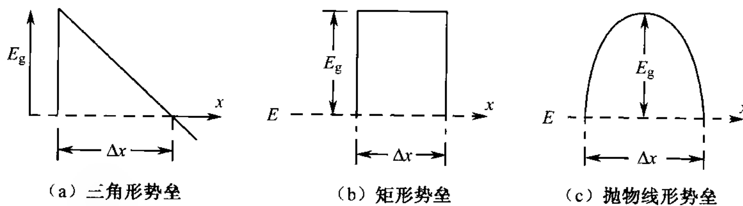
只要知道 $V(x)$ 的具体表式，便可求 $P$。

(2) 对于图 6-3(a)所示三角形势垒，可取 $x_2=0$，则 $x_1=-\Delta x$，这种势垒的能量是 $x$ 的线性函数，其斜率为 $-E_g/\Delta x$，故

$$V(x)-E=-(x/\Delta x)E_g \tag{7}$$

将此式代入式(6)即得

$$P=\exp[-(8\pi/3)(2m_n^*/h^2)]^{\frac{1}{2}}E^{\frac{1}{2}}{}''''{}_g\Delta x \tag{8}$$




(a) 三角形势垒　(b) 矩形势垒　(c) 抛物线形势垒

图 6-3　三种特殊形状势垒

对于图 6-3(b)所示矩形势垒，取 $x_1=0$，则 $x_2=\Delta x$，这种势垒的能量在 $x<0$ 及 $x>x_2$ 时，$V(x)=E$，在 $0\leqslant x\leqslant x_2$ 区间内写为

$$V(x)-E=E_g \tag{9}$$

将此式代入式(6)即得

$$P=\exp[-4\pi(2m_n^*/h^2)E_g^{\frac{1}{2}}\Delta x] \tag{10}$$

对于图 6-3(c)所示抛物线形势垒，取 $x_2$ 与 $x_1$ 的中点为坐标原点，利用抛物拱形的公式得

$$V(x)-E=E_g-[4E_g/(\Delta x)^2]x_2 \tag{11}$$

将此式代入式(6)即得

$$P=\exp[-\pi^2(2m_n^*/h^2)^{\frac{1}{2}}E_g^{\frac{1}{2}}\Delta x] \tag{12}$$

由式 (8)、式(10)和式(12)可以看到，虽然势垒形状各异，但隧穿概率的差别不大，它们的指数项均比例于 $-(2m_n^*/h^2)^{\frac{1}{2}}E_g^{\frac{1}{2}}\Delta x$，只是指数中的常数稍有不同，各为 $8\pi/3$，$4\pi$，$\pi^2$，三者比值为 1.33 : 2 : 1.57。因此，可认为 $P$ 主要取决于势垒高度(即禁带宽度) $E_g$ 和势垒宽度 $\Delta x$，而 $\Delta x$ 取决于 pn 结两侧掺杂浓度，通常 $\Delta x$ 大约在 $10^2$ Å 数量级。

(3) 设砷化镓 pn 结中具有图 6-2(a)所示三角形势垒，势垒高度 $E_g=1.35\text{eV}$，宽度 $\Delta x=40\text{Å}$，且 $m_n^*=0.068m_c$，将这些数据代入式(8)得电子从 p 区价带隧穿到 n 区导带的概率为

$$P=\exp\left\{-\frac{8\pi}{3}\left[\frac{(2\times0.068\times9.1\times10^{-31})^{\frac{1}{2}}}{6.62\times10^{-34}}\right]\times(1.35\times1.6\times10^{-19})^{\frac{1}{2}}\times40\times10^{-10}\right\}$$

$$=e^{-8.28}\approx2.5\times10^{-4}$$

# 第7章　金属半导体接触

**主题词**

金属、半导体功函数，半导体表面势，电子、空穴的阻挡层、反阻挡层，整流接触，肖特基二极管，欧姆接触。

## 7.1　理论概要与重点分析

（1）金属与半导体紧密接触时，由于它们的功函数差（费米能级差），会使载流子相互流动。在接触处的金属和半导体表面形成电偶极层，半导体载流子浓度低，相对金属有一个较厚的表面电荷层，在这个空间电荷层中，形成从表面指向内部或由内部指向表面的自建电场，出现表面与内部之间的电势差，称为半导体的表面势。设半导体内部电势为零，表面电势比内部高，表面势为正；表面电势比内部低，表面势为负。由于金属中的载流子浓度高，其电荷集中在表面极薄层内，所以接触面与金属内部电势差可以忽略，这样半导体的表面势就是金—半接触的接触电势差。

$$V_{ms} = V_s = -\frac{W_m - W_s}{q} \tag{7.1}$$

其中，$W_m$ 为金属的功函数；半导体的功函数

$$W_s = \chi + [E_c - (E_F)_s] \tag{7.2}$$

$\chi$为半导体的电子亲合能。

由于接触电势差的存在，使半导体表面能带发生弯曲形成电子势垒，平衡时势垒高度

$$qV_D = -qV_s = W_m - W_s \tag{7.3}$$

金属一边相对半导体的电子势垒

$$q\Phi_{ns} = W_m - \chi \tag{7.4}$$

（2）金—半接触形成多子阻挡层（n 型阻挡层，半导体表面能带上弯；p 型阻挡层，表面能带下弯）称为肖特基接触，它具有整流效应。与 pn 结类似，认为外加电压主要降落在阻挡层上。当外加正向电压时，阻挡层的势垒降低，反向电压时，阻挡层的势垒增高，而金属相对于半导体的势垒高度，不随外加电压变化。这样在正向电压下，有一个随外加电压增加而增大的正向电流；反向时，有一个不随外加电压变化的反向饱和电流，因而肖特基结具有整流特性。

利用金—半接触的整流特性，可制成肖特基势垒二极管。这种二极管主要是利用多数载流子工作，没有少数载流子的存储效应，所以它的使用频率高，开关速度快；另外，由于它的反向饱和电流较大，与 pn 结相比，在同样使用电流下，其正向导通电压低，对 Si 约 0.3V。

(3) 为了定量计算肖特基接触的电流电压特性，根据不同材料的势垒情况，发展了三种理论分析法。这就是扩散理论，热电子发射理论和二者相结合的扩散—发射理论。

① 对厚阻挡层，即势垒宽度比电子的平均自由程大得多，或者说电子迁移率小，平均自由程较短，电子由半导体进入金属在势垒区要发生多次碰撞，利用扩散理论分析较为合适。

② 对于薄的阻挡层，电子的平均自由程比势垒宽度大得多时，电子可以不经过碰撞即可进入金属，适宜于用热电子发射理论进行分析。

根据这种模型，半导体中费米能级在势垒区没有降落，在接触边界才突然降到与金属的费米能级重合。所以在半导体中只要那些能量高出边界处势垒顶点，而且由半导体指向金属方向的速度分量大于零的电子均能流入金属。外加电压的作用只是提高半导体导带中电子的能量。因此，从半导体流向金属的电子形成的电流(即从金属流入半导体的正向电流)为

$$J_{s\to m} = qn'\overline{v_x} \tag{7.5}$$

式中，$n'$为外加电压 $V$ 时半导体中能超过势垒顶点的电子浓度，$\overline{v_x}$为这些电子中指向金属方向速度分量大于零的电子平均速度，把这二者求出后代入(7.5)式，得

$$J_{s\to m} = A^* T^2 \exp\left(-\frac{q\Phi_{ns}}{k_0 T}\right)\exp\left(\frac{qV}{k_0 T}\right) \tag{7.6}$$

由金属流入半导体的电子电流与 $V=0$ 时 $J_{s\to m}$的大小相等方向相反。

$$J_{m\to s} = -J_{s\to m}|_{V=0} = -A^* T^2 \exp\left(-\frac{q\Phi_{ns}}{k_0 T}\right) \tag{7.7}$$

通过二极管的净电流为两者之和

$$\begin{aligned} J &= A^* T^2 e^{-\frac{q\Phi_{ns}}{k_0 T}}\left[\exp\left(\frac{qV}{k_0 T}\right)-1\right] \\ &= J_{sT}\left[\exp\left(\frac{qV}{k_0 T}\right)-1\right] \end{aligned}$$

可见，它与 pn 结有类似的电流电压关系，但其反向饱和电流 $J_{sT}$对温度有更强烈的依赖关系。

Ge、Si、GaAs 都有较高的载流子迁移率，因而用热电子发射理论来分析用这些材料制成的肖特基势垒二极管的电流传输比较合适。

③ 既有扩散又有热电子发射机制的更一般情况，可用二者相结合的扩散—发射理论进行分析。

(4) 在肖特基二极管中，我们只研究了多数载流子的电流传输，忽略了少数载流子的作用，这在一般情况下是可以的。但在某些特殊情况下，可能少数载流子的注入起着不可忽视的作用，这时在讨论电流传输时，就必须考虑少子的注入问题。

对 n 型电子势垒，能带上弯，当加正向电压时，表面势垒降低，有大量的电子注入金属。在价带中，表面空穴浓度比内部高，势垒降低，则空穴向内部扩散，金属中的空穴注入半导体补充，形成由金属流向半导体正向电流的另一部分。由少子注入引起的电流与总电流之比，用 $r$ 表示。对 n 型阻挡层有

$$r = \frac{qn_i^2 D_p}{N_D L_p A^* T^2 \exp\left(-\frac{q\Phi_{ns}}{k_0 T}\right)} \tag{7.8}$$

在探针小半径球面接触时，$r$ 较大；而在平面接触中，$r$ 很小可不考虑少子的注入问题。

（5）在实用中，如器件和集成电路的引线接触，不需要整流接触，而需要另一种重要的欧姆接触。其要求是接触处的附加电阻小，正反向有对称的电流电压特性，通电时不影响连接器件的性能。由于界面态的存在，金属与低掺杂半导体接触时，不可能形成反阻挡层接触，也就不可能实现良好的欧姆接触。为了形成良好的欧姆接触，一般是采用隧道效应原理，将半导体表面重掺杂再与金属接触即采取金属—$n^+$-n 或金属—$p^+$-p 结构。

## 7.2 概念思考与练习题

**【7-1】** 金属和半导体的功函数是如何定义的？半导体的功函数与哪些因素有关？并写出其表达式。

**【7-2】** 说明金属—半导体接触在什么条件下能形成接触势垒(阻挡层)？分析 n 型和 p 型半导体形成阻挡层和反阻挡层的条件。

**【7-3】** 分别画出 n 型和 p 型半导体与金属接触时的能带图(分为 $W_s > W_m$，$W_s < W_m$ 并忽略表面态的影响)。

**【7-4】** 半导体表面态是怎样影响势垒高度的？分别讨论受主型表面态和施主型表面态的影响。对 $W_m < W_s$ 的金属-n 型半导体接触，在什么情况下有可能形成阻挡层而非反阻挡层？为什么？

**【7-5】** 什么叫欧姆接触？实现半导体 -金属的欧姆接触有几种方法？简要说明其物理原理。

**【7-6】** 应该怎样制做 n 型硅和金属铝接触才能实现(1)欧姆接触；(2)整流接触。

**【7-7】** 试比较 p-n 结和肖特基结的主要异同点。与 p-n 结二极管相比肖特基二极管在性能上还具有哪些特别之处？

**【7-8】** 为什么金属—半导体二极管(肖特基二极管)减少了载流子注入后的存储时间？

**【7-9】** 为什么对轻掺杂的 p 型半导体不能用四探针方法测量其电阻率？对轻掺杂的 n 型半导体如何？分析其物理原理。

**【7-10】** 什么叫少数载流子注入效应？在金属—半导体接触中什么样的接触形式这种效应更显著？为什么？

**【7-11】** 镜像力和隧道效应是如何影响金属-半导体接触势垒的？

**【7-12】** 比较扩散理论和热电子发射理论在解决肖特基二极管整流特性时其主要区别在什么地方？

**【7-13】** 金属与重掺杂的半导体接触能够形成欧姆接触，说明其物理原理。

【7-14】 以 n 型半导体为例画出界面态与半导体表面交换电荷以后处于热平衡时的能带图。标明电场 $E$ 的方向，$E_c$ 和 $E_F$ 的走向。

【7-15】 指出影响肖特基势二极管正向电流的因素。

【7-16】 说明利用金属—半导体接触测量半导体表面层杂质浓度分布的原理并推导：

$$N(x)=\frac{C_j^3}{qA_j^2\varepsilon_r\varepsilon_0}\left[\frac{1}{-\frac{dC_j}{dV}}\right]$$

式中，$C_j$ 为电压 $V$ 时的势垒微分电容；$A_j$ 为结面积。

【7-17】 试从载流子运动特性讨论肖特基势垒二极管在高速集成电路和微波领域中有重要应用的原因？

# 7.3 典型例题解析

**【例 7-1】** 设 p 型硅(如图 7-1 所示)，受主浓度 $N_A=10^{17}/cm^3$，已知：$W_{Ag}=4.18eV$；$W_{Pt}=5.36eV$；$N_v=10^{19}/cm^3$；$E_g=1.12eV$；硅电子亲合能$\chi=4.05eV$ 试求：

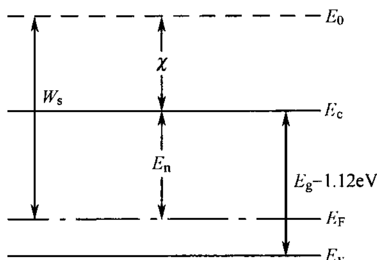



图 7 1

(1) 室温下费米能级 $E_F$ 的位置和功函数 $W_s$；

(2) 不计表面态的影响，该 p 型硅分别与铂和银接触后是否形成阻挡层？

(3) 若能形成阻挡层，求半导体一边势垒高度。

**解：**(1) 室温下，可认为杂质全部电离，若忽略本征激发

则
$$p_0=N_A=N_v e^{-\frac{E_F-E_v}{k_0T}}$$

得
$$\begin{aligned}E_F&=E_v+k_0T\ln\frac{N_v}{N_A}=E_v=0.026\ln\frac{10^{19}}{10^{17}}\\&=E_v+0.12(eV)\\E_n&=E_g-0.12\\&=1.12-0.12\\&=1.0(eV)\end{aligned}$$

所以功函数

$$W_s = E_n + \chi = 1.0 + 4.05$$
$$= 5.05(\text{eV})$$

（2）不计表面态的影响。对 p 型硅，当 $W_s > W_m$ 时，金属中电子流向半导体，使得半导体表面势 $V_s > 0$，空穴附加能量 $qV_s$，使能带向下弯，形成空穴势垒。所以，p 型硅和银接触后半导体表面形成空穴势垒，即空穴阻挡层。又因 $W_{pt} = 5.36\text{eV} > W_s = 5.05\text{eV}$，所以 p 型硅和铂接触后不能形成阻挡层。

（3）银和 p-Si 接触形成的阻挡层其势垒高度：

$$qV_D = W_m - W_s = 4.81 - 5.05 = -0.24(\text{eV})$$

**【例 7-2】** 有[100]晶向的 n 型单晶硅片和某一金属接触形成肖特基二极管，其参数为 $W_m = 4.7\text{eV}$，$\chi_s = 4.0\text{eV}$，$N_c = 10^{19}\text{cm}^{-3}$，$N_D = 10^{15}\text{cm}^{-3}$，半导体硅的相对介电常数为 $\varepsilon_r = 12$，忽略表面态的影响，计算室温下：

（1）零偏时势垒高度接触电势差和势垒宽度；

（2）正偏为 0.2V 时的热发射电流。设 $\dfrac{A^*}{A} = 2.1$，$A = 120\text{A/cm}^2$。

**解：**（1）由 $N_D = n_0 = N_c e^{-\frac{E_c \quad E_F}{k_0 T}}$ 可求得

$$E_c - E_F = k_0 T \ln \frac{N_c}{N_D} = 0.026 \ln \frac{10^{19}}{10^{16}} = 0.17(\text{eV})$$

所以 $$W_s = \chi_s + (E_c - E_F) = 4.17(\text{eV})$$

势垒高度： $$qV_D = W_m - W_s = 4.7 - 4.17 = 0.53(\text{eV})$$

自建电势差： $$V_D = 0.53(\text{V})$$

势垒宽度：

$$d = \left(\frac{2\varepsilon_r \varepsilon_0 V_D}{qN_D}\right)^{\frac{1}{2}}$$
$$= \left(\frac{2 \times 12 \times 8.85 \times 10^{-14} \times 0.53}{1.6 \times 10^{-19} \times 10^{16}}\right)^{\frac{1}{2}}$$
$$= 2.6 \times 10^{-5}(\text{cm})$$

（2）$q\varphi_{ns} = qV_D + E_n = 0.53 + 0.17 = 0.7(\text{eV})$

故

$$J = A^* T^2 e^{-\frac{q\varphi_{ns}}{k_0 T}} \left(e^{\frac{qV}{k_0 T}} - 1\right)$$
$$= 2.1 \times 120 \times (300)^2 e^{-\frac{0.7}{0.026}} \left(e^{\frac{0.2}{0.026}} - 1\right)$$
$$= 8.4 \times 10^{-2}(\text{A/cm}^2)$$

**【例 7-3】** 设某金属与(111)晶面 n-Si 组成肖特基二极管，已知其接触后半导体一边的势垒高度为 0.50eV，$N_D = 10^{15}\text{cm}^{-3}$，$N_c = 2.8 \times 10^{19}\text{cm}^{-3}$，电子亲和能 $\chi = 4.05\text{eV}$，$l_p = 10\mu\text{m}$，$D_p = 15\text{cm}^2/\text{s}$，$n_i = 1.5 \times 10^{10}\text{cm}^{-3}$，$A^* = 252\text{A/cm}^2\text{K}^2$（里查德常数），求：（1）加 0.5V 正向偏压后，计算室温下注入少数载流子电流密度；（2）计算该金属的功率函数；（3）用热电子发射理论的结果，计算总电子电流密度；（4）计算少数载流子流入比。

**解:**（1）注入少子的电流密度 $J_p$ 为

$$J_p = \frac{qn_i^2 D_p}{N_D L_p}(e^{qv/k_0T} - 1)$$

$$J_p = \frac{1.6\times10^{-19}\times(1.5\times10^{10})^2\times15}{10^{15}\times10^{-3}}\times(e^{\frac{0.5}{0.026}} - 1)$$

$$= 0.12(A/cm^2)$$

（2）计算金属的功函数

$$E_n = E_c - E_{Fs} - k_0T\ln\frac{N_c}{N_D} = 0.026\ln\frac{2.8\times10^{19}}{10^{15}}$$

$$= 0.27(eV)$$

$$W_s = \chi + E_n = 4.05 + 0.27 = 4.32(eV)$$

$$W_m = W_s + qV_D = 4.32 + 0.50 = 4.82(eV)$$

（3）计算总的电子电流密度

$$J_n = A^* T^2 e^{\frac{-q\Phi_{ns}}{k_0T}}(e^{\frac{q_v}{k_0T}} - 1)$$

$$= 252\times(300)^2 e^{\frac{0.77}{0.026}}(e^{\frac{0.5}{0.026}} - 1)$$

$$= 3.20\times10^4 A/cm^2$$

式中，$q\Phi_{ns} = W_m - \chi = 4.82 - 4.05 = 0.77(eV)$

（4）计算少数载流子注入比 $\gamma$

$$\gamma \approx \frac{J_p}{J_n} = \frac{0.12}{3.20\times10^4} = 3.7\times10^{-6}$$

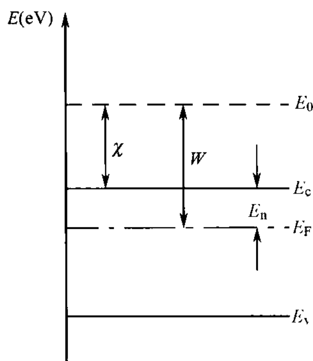


图 7-2　例 7-4 图

**【例 7-4】** 施主浓度 $N_D = 10^{17}/cm^3$ 的 n 型硅（如图 7-2所示），室温下功函数是多少？若不考虑表面态的影响，它分别同 Al、Au、Mo 接触时，是形成阻挡层还是反阻挡层？硅的电子亲合能取 4.05eV。设 $W_{Al} = 4.18eV$，$W_{Au} = 5.20eV$，$W_{Mo} = 4.21eV$。

**解:** 设室温下杂质全部电离，则

$$n_0 = N_D = N_c e^{-\frac{E_c - E_F}{k_0T}}$$

故

$$E_F = E_c + k_0T\ln\frac{N_D}{N_c}$$

$$= E_c + 0.026\ln\frac{10^{17}}{2.8\times10^{19}}$$

$$= E_c - 0.147(eV)$$

即

$$E_F \approx E_c - 0.15(eV)$$

故 n-Si 的功函数为

$$W_s = \chi + (E_c - E_F) = 4.05 + 0.15 = 4.20(eV)$$

已知：$W_{Al} = 4.18eV$，所以 $W_{Al} < W_s$，故二者接触形成反阻挡层。

$$W_{Au} = 5.20\text{eV}, W_{Mo} = 4.21\text{eV}$$

显然

$$W_{Au} > W_{Mo} > W_s$$

故 Au 与 n-Si 接触，Mo 与 n-Si 接触均形成阻挡层。

**【例 7-5】** 受主浓度 $N_A = 10^{17}/\text{cm}^3$ 的 p 型锗(如图 7-3 所示)，室温下功函数为多少？若不考虑表面态的影响，它分别同 Al、Au、Pt 接触时形成阻挡层还是反阻挡层？锗的电子亲合能取 4.13eV。设 $W_{Al}=4.18\text{eV}$，$W_{Au}=5.20\text{eV}$，$W_{pt}=5.43\text{eV}$。

**解**：设室温下杂质全部电离，则有

$$p_0 = N_A = N_v e^{-\frac{E_F - E_v}{k_0 T}}$$

所以

$$E_F = E_v + k_0 T \ln \frac{N_v}{N_A}$$

$$= E + 0.026 \ln \frac{6 \times 10^{18}}{10^{17}}$$

$$= E_v + 0.11(\text{eV})$$

故该 p 型锗的功函数为：

$$W_s = \chi + E_n = x + E_q - (E_F - E_v) = 4.13 + 0.67 - 0.11$$
$$= 4.69(\text{eV})$$

已知：$W_{Al}=4.18\text{eV}$，显然，$W_s > W_{Al}$形成 p 型阻挡层。而

$$W_{Au}=5.20(\text{eV}) \qquad W_{pt}=5.43(\text{eV})$$

显然二者的功函数均大于 $W_s$，故该 p-Si 和 Au，Pt 接触形成 p 型反阻挡层。

**【例 7-6】** 有一块施主浓度 $N_D=10^{16}/\text{cm}^3$ 的 n 型锗材料(如图 7-4 所示)，在它的(111)面上与金属接触制成肖特基势垒二极管，已知：$V_D=0.4\text{V}$，求加上 0.3V 电压时的正向电流密度。

**解**：考虑到镜像力的影响，势垒高度降低量为

$$q\Delta\varphi = \frac{1}{4}\left[\frac{2q^7 N_D}{\pi^2 \varepsilon_r^3 \varepsilon_0^3}(V_D - V)\right]^{\frac{1}{4}}$$

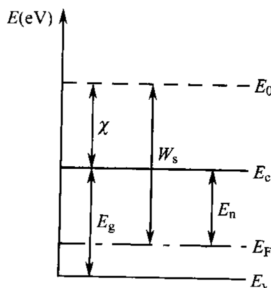



图 7-3 例 7-5 图

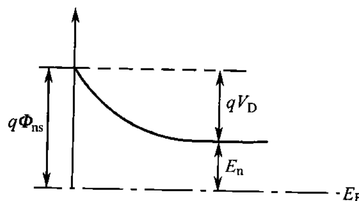



图 7-4 例 7-6 图

代入数据后

$$q\Delta\varphi = \frac{1}{4}\left[\frac{2 \times (1.6 \times 10^{-19})^7 \times 10^{16}}{3.14^2 \times 16^3 \times (8.85 \times 10^{14})^3} \times (0.4 - 0.3)\right]^{\frac{1}{4}}$$

$$= \frac{1}{4}\left[\frac{2 \times 26.84 \times 10^{-133} \times 10^{16} \times 10^{1}}{4 \times 10^{4} \times 6.9 \times 10^{2} \times 10^{-42}}\right]^{\frac{1}{4}}$$

$$= \frac{1}{4}(1.9 \times 10^{-82})^{\frac{1}{4}} = 9.3 \times 10^{-22}(\mathrm{J})$$

所以
$$\Delta\varphi = 9.3 \times 10^{-22} / 1.6 \times 10^{-19}$$
$$= 5.8 \times 10^{-3} \approx 0.006(\mathrm{V})$$

故实际势垒高度 $q(V_D - \Delta\varphi) = q(0.4 - 0.006) = 0.394(\mathrm{eV})$

正向电流密度
$$J = A^* T^2 \mathrm{e}^{-\frac{q\varphi_{ns}}{k_0 T}} (\mathrm{e}^{\frac{qV}{k_0 T}} - 1)$$

因为 $E_n = E_c - E_F = k_0 T \ln \frac{N_c}{n_0} = 0.026 \ln \frac{0.4 \times 10^{19}}{10^{16}} = 0.18(\mathrm{eV})$

所以
$$q\varphi_{ns} = qV_D + E_n \approx 0.574(\mathrm{eV})$$

已知(里查德常数) $A^* = 1.11A = 1.11 \times 120\mathrm{A/cm^2 \cdot K^2}$

故
$$J = 1.11 \times 120 \times 300^2 \times \mathrm{e}^{-\frac{0.574}{0.026}} (\mathrm{e}^{\frac{0.3}{0.026}} - 1)$$
$$= 316.8(\mathrm{A/cm^2})$$

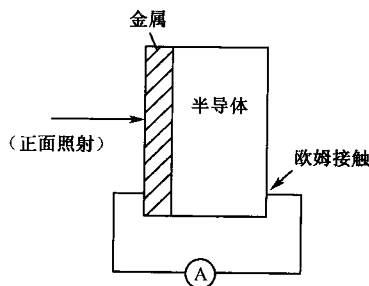



图 7-5 光电测量装置示意图

**【例 7-7】** 金属钡($W_m = 2.48\mathrm{eV}$)表面受到紫色光($\lambda = 430\mathrm{nm}$)照射时,能否放出光电子,放出能量为多少?在图 7-5 所示的光电测量装置中,如果光由正面照射,且 $h\nu > q\Phi_{ns}$将产生怎样的结果;此时若金属层很薄,且 $h\nu > E_g$(半导体禁带宽度),其结果又如何?请解释如何用这一方法来测量金属—半导体接触时金属一边的势垒高度。

**解:**(1) 求紫色光照射在金属钡表面的情况

$$h\nu = hC/\lambda = 6.623 \times 10^{-34} \times 3 \times 10^{10} / (430 \times 10^{-7} \times 1.6 \times 10^{-19})$$
$$= 2.89(\mathrm{eV})$$

由于 $h\nu > W_m$,故可以释放出光电子,其释放出能量为

$$E = h\nu - W_m = 2.89 - 2.48 = 0.41(\mathrm{eV})$$

(2) 光照金属与半导体接触时的情况

若光由正面照射,且 $h\nu > q\Phi_{ns}$ 时,将在金属中激光发出光电子;若金属膜很薄,且 $h\nu > E_g$,将在半导体中产生电子—空穴对。

由此,若 $h\nu > q\Phi_{ns}$的能量的光照射金属—半导体接触结时,则从金属费米能级上激发出电子,将有足够能量进入半导体,产生光电动势,在外电路中引起电流。每吸收一个能量为 $h\nu$ 的光子产生的光电流 $R$ 由下式给出:

$$R = \frac{T^2}{B}\left[\frac{\pi^2}{6} + \frac{x^2}{6} - \left(\mathrm{e}^{-x} - \frac{\mathrm{e}^{-2x}}{4} + \frac{\mathrm{e}^{-3x}}{9} - \cdots\right)\right]$$

式中 $B$ 为常数,$x = (h\nu + h\nu_0)/k_0 T$,阈值能量 $h\nu_0 = q\Phi_{ns}$。

当 $x \gg 1$, $R$ 与 $\{h(\nu-\nu_0)\}^2$ 成正比。所以$\sqrt{R}$对 $h\nu$ 作图应该是直线，该直线在 $h\nu$ 轴上的截矩等于 $h\nu_0$，直接得到了金属与半导体接触时在金属一边的势垒高度。

**【例 7-8】** 利用金属—半导体接触，推导非均匀掺杂半导体的掺杂浓度的表达式

$$N(x_d) = \frac{2}{q\varepsilon_0\varepsilon_s[\mathrm{d}(1/C^2)/\mathrm{d}V_\alpha]A^2}$$

并加以讨论和说明。

**解：** 对于非均匀掺杂的半导体，金属和半导体结的空间电荷的示意图如图 7-6 所示。

在一给定的直流反偏压 $V_a$ 下($V_a<0$)，空间电荷层的宽度为 $x_d$，稍微增加 $V_a$ 值，就会引起 $Q_s$ 的一个小的增加，即

$$Q_s = qA\int_0^{x_d} N(x)\mathrm{d}x$$

因此，电压的增量 $\mathrm{d}V_a$，引起 $Q_s$ 的增量 $\mathrm{d}Q_s$，其值为

$$\mathrm{d}Q_s = qN(x_d)A\mathrm{d}x = C\mathrm{d}V_a$$

式中，小信号电容 $C$ 是在 $V_a$ 下进行测量的，$A$ 为金属—半导体结的面积。上式可以写成

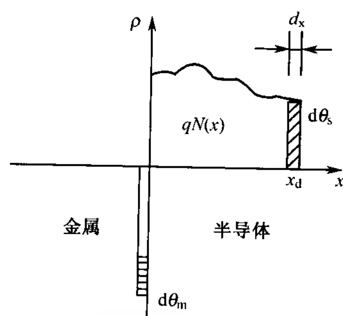



图 7-6 金属和非均匀掺杂半导体结的空间电荷分布示意图

$$N(x_d) = \frac{C}{qA(\mathrm{d}x/\mathrm{d}V_a)}$$

而小信号电容 $C$ 可用下式表示

$$C = A\varepsilon_0\varepsilon_{rs}/x_d$$

式中，$\varepsilon_0$ 为真空电容率，$\varepsilon_{rs}$为半导体的相对介电常数。因此

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}V_s} = \frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}C}\frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}V_a} = -\frac{\varepsilon_0\varepsilon_{rs}A}{C^2}\left(\frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}V_a}\right)$$

于是

$$N(x_d) = \frac{C}{qA\left(\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}V_a}\right)} = -\frac{C^3}{q\varepsilon_0\varepsilon_{rs}A^2\left(\frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}V_a}\right)}$$

由于

$$\mathrm{d}\left(\frac{1}{C^2}\right)\mathrm{d}V_a = -\left(\frac{2}{C^2}\right)\frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}V_a}$$

故

$$N(x_d) = \frac{2}{q\varepsilon_0\varepsilon_{rs}[\mathrm{d}(1/C^2)/\mathrm{d}V_a]A^2}$$

上述结果说明，$1/C^2$ 与反偏电压的曲线的斜率直接可以表示出空间电荷层边缘的掺杂浓度，用这个斜率除$(2/q\varepsilon_0\varepsilon_{rs}\times A^2)$，立即可以得出 $N(x_d)$。“半导体杂质分布仪”就是利用了这个道理，把斜率转换成等价的掺杂浓度，并在该仪器上带有直读仪表。

**【例 7-9】** 某金属与均匀掺杂的 n-Si 材料接触，组成肖特基势垒二极管，已知半导体一边的势垒高度 $qV_D=0.6\mathrm{eV}$, $N_D=5\times10^{16}\mathrm{cm}^{-3}$，试求在 5V 反偏电压下的空间电荷区厚度、界面处半导体中最大电场及单位面积的势垒电容，并做出该器件的 $1/C^2$ 与$(V_D-V)$的关系曲线。

**解：** (1) 求 5V 反偏电压下的空间电荷区宽度 $d$ 和界面处半导体中最大电场 $E_M$。

由于肖特基势垒通常也是足够高的(1eV 量级),因此耗尽层近似仍然是很好的近似,所以金属与半导体接触势垒的电荷和电势分布与单边突变 pn 结完全相似,其空间电荷区厚度 $d$ 的公式为

$$d=\left[\frac{2\varepsilon_0\varepsilon_{rs}(V_D-V)}{qN^*}\right]^{\frac{1}{2}}$$

式中 $N^*$ 是约化浓度,此处将半导体掺杂浓度 $N_D$ 代入,且 $V_D=0.6V$,$V=-5V$,$\varepsilon_0=8.85\times10^{-14}A\cdot s/(V\cdot cm)$,$\varepsilon_{rs}=10$,将这些数据代入上式,即得

$$\begin{aligned}d&=\left[\frac{2\times12\times8.85\times10^{-14}\times(0.6+5)}{1.6\times10^{-19}\times5\times10^{16}}\right]^{\frac{1}{2}}\\&=3.86\times10^{-5}(cm)\end{aligned}$$

界面处半导处中最大电场由下式表示

$$\begin{aligned}E_M&=\left[\frac{2qN(V_D-V)}{\varepsilon_0\varepsilon_{rs}}\right]^{\frac{1}{2}}\\&=\left[\frac{2\times1.6\times10^{-19}\times5\times10^{16}\times(0.6+5)}{8.85\times10^{14}\times12}\right]^{\frac{1}{2}}\\&=2.9\times10^5(V/cm)\end{aligned}$$

(2) 求单位面积电容及 $1/C^2\sim V$ 的关系曲线。

单位面积的势垒电容公式为

$$\begin{aligned}C&=\left[\frac{\varepsilon_0\varepsilon_{rs}qN}{2(V_D-V)}\right]^{\frac{1}{2}}\\&-\left[\frac{8.85\times10^{-14}\times12\times1.6\times10^{-19}\times5\times10^{16}}{2\times5.6}\right]^{\frac{1}{2}}\\&=2.75\times10^{-8}(F/cm^2)\end{aligned}$$

在不同电压下的单位面积势垒电容列表如下:

| $V(V)$ | 0 | −1 | −2 | −3 | −4 | −5 | −6 | 8 | 10 |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $C(F/cm^2\times10^{-8})$ | 8.41 | 5.15 | 4.05 | 3.44 | 3.05 | 2.75 | 2.53 | 2.21 | 2.01 |
| $\frac{1}{C^2}(cm^2/F)^2\times10^{14}$ | 1.41 | 3.77 | 6.10 | 8.45 | 10.75 | 13.03 | 15.61 | 20.47 | 24.75 |

**【例 7-10】** 图 7-7 所示的是用平面工艺制成的芯片的横截面。p 型硅衬底电阻率为 $10\Omega\cdot cm$,外延层厚度为 $2.5\mu m$,施主杂质浓度为 $5\times10^{15}cm^{-3}$。图中 A 处为铂接触,是直接做在外延层硅的表面上的。若忽略所有的边界效应,试求:

(1) p 型衬底、n 型处延层的费米能级与本征硅费米能级之差 $E_F-E_i$;(2) 若 Pt-Si 结金一边的势垒高度 $q\Phi_{ns}$ 测量值为 0.85eV,求 Pt-Si 结接触电势差 $V_D$ 为多少?(3) Pt-Si 结的势垒区加反向偏电压,在场强达到 $3\times10^5V/cm$(击穿场强)之前,Pt-Si 结的势垒区能否扩展到 p 型衬底上?若接触点 B(为扩散到外延层 $1.5\mu m$ 深的 $n^+$ 接触)与接触点 C 短

路且接地，电压加在接触点 A 上，达到这种 Pt 接触下的外延层 $n^-$ 的完全耗尽，所加的电压是多少伏？(4) 应用肖特基理论，定性地画出 1-1′剖面的能带图(Pt-Si 结到衬底)，标出真空中静止电子能量 $E$。

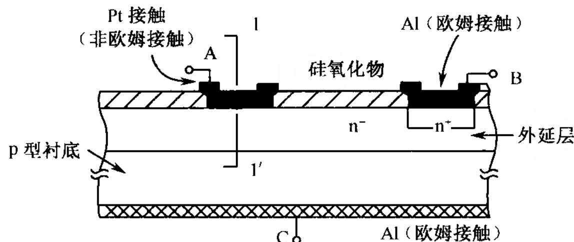



图 7-7　硅芯片截面图

**解:**(1) 求 $E_F-E_i$、$V_D$

对于 $n^-$ 层，有

$$E_F-E_i=k_0T\ln\frac{n}{n_i}=0.026\ln\frac{3\times10^{15}}{1.5\times10^{10}}=0.32(\text{eV})$$

对于 p 层，有

$$E_i-E_F=k_0T\ln\frac{p}{n_i}=0.026\ln\frac{1\times10^{15}}{1.5\times10^{10}}=0.29(\text{eV})$$

若 $q\Phi_{ns}=0.85\text{eV}$

$$qV_D=q_{ns}-E_n=0.85-k_0T\ln\frac{N_c}{N_D}$$

$$=0.85-0.026\frac{2.8\times10^{19}}{3\times10^{15}}=0.61(\text{eV})$$

故

$$V_D=0.61(\text{V})$$

(2) 求使 $n^-$ 外延层完全耗尽的反偏电压

Pt-Si 结的势垒区加反偏电压，其场强达到 $3\times10^5\text{V/cm}$(击穿场强)时，界面处达到最大场强，故

$$E_m=\left[\frac{2qN(V_D-V)}{\varepsilon_0\varepsilon_{rs}}\right]^{\frac{1}{2}}$$

此时空间电荷区厚度 $d$ 为

$$d=\left[\frac{2\varepsilon_0\varepsilon_{rs}(V_D-V)}{qN}\right]^{\frac{1}{2}}$$

先求所加的反偏电压值，即

$$V_D-V=\frac{E_m^2\varepsilon_0\varepsilon_{rs}}{2qN}=\frac{(3\times10^5)^2\times12\times8.85\times10^{-14}}{2\times1.6\times10^{-19}\times3\times10^{15}}$$

$$=99.56(\text{V})$$

$$V = -99.56 + 0.61 = -98.95(\text{V})$$

再求 $d$ 值，即

$$d = \left[\frac{2 \times 8.85 \times 10^{-14} \times 12 \times 99.56}{1.6 \times 10^{-19} \times 3 \times 10^{15}}\right]^{\frac{1}{2}} = 6.64(\mu\text{m})$$

由此，在最大场强下，Pt-Si 结的势垒区已经达到 p 型衬底，因为外延层厚度只有 2.5μm。

实际上达到外延层 $n^-$ 耗尽只要 $d=2.5\mu\text{m}$，此时所加反向电压应为

$$V_D - V = \frac{d^2 qN}{2\varepsilon_0\varepsilon_{rs}} = \frac{(2.5 \times 10^{-4})^2 \times 1.6 \times 10^{-19} \times 3 \times 10^{15}}{2 \times 12 \times 8.85 \times 10^{-14}}$$

$$= 14.12(\text{V})$$

$$V = -14.12 + 0.61 = -13.51(\text{V})$$

(3) 画出剖面能带图

1-1′剖面能带图如图 7-8 所示，这是因为理想的肖特基势垒，电子亲和能决定于材料，其 $\chi$ 值是不变的；在半导体中 $E_F$ 是不变的；$E_0$ 恰好表示自由电子的能量，$E_0$ 是连续曲线，是空间连续的单值函数。

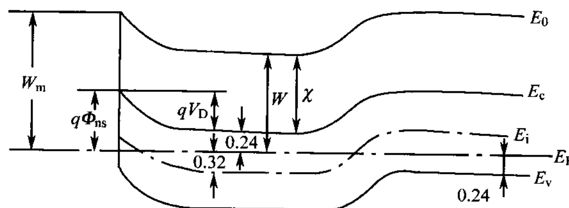



图 7-8　1 1 剖面能带图(Pt-n/Si-p/Si)

**【例 7-11】** 比较一下图 7-9 所示的肖特基势垒二极管与 pn 结二极管的反向饱和电流密度的大小，并证明反向饱和电流密度之比为$\frac{\sqrt{3}}{4}\left(\frac{\tau_n}{\tau_{ce}}\right)^{1/2}$，即

$$\frac{J_{sT}}{J_s} = \frac{\sqrt{3}}{4}\left(\frac{\tau_n}{\tau_{ce}}\right)^{1/2}$$

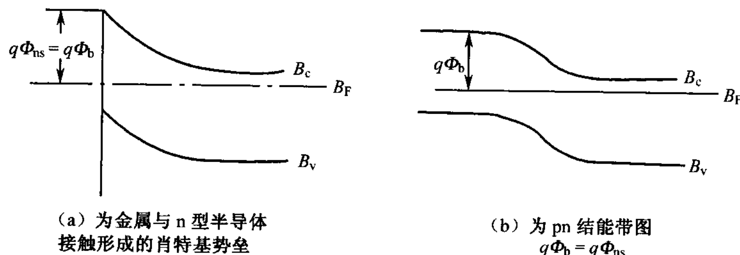



图 7-9　例 7-11 图

设电流完全由电子输运，pn 结为 $n^+p$ 结，肖特基二极管的势垒($q\Phi_{ns}$)与 pn 结中势垒高度(如图 7-9 中(b)所示)$q\Phi_b$ 相同，$J_{sT}$ 为热电子发射理论得出的肖特基二极管的饱和

电流密度，$J_s$ 为理想的 pn 结的饱和电流密度，$\tau_n$ 为电子寿命 $\tau_{ce}$是 p 型一侧电子碰撞的平均时间。

**解**：由于 $n^+p$ 结另考虑电子流，故 pn 结反向饱和电流密度为

$$J_s = qD_n \frac{n_{p0}}{L_n} = \frac{qD_n N_c}{L_n} \exp\left(-\frac{q\Phi_b}{k_0 T}\right) \tag{1}$$

式中，$D_n$、$L_n$ 分别为 p 型侧电子的扩散系数和扩散长度。

由动力学方程可得

$$D_n = \frac{1}{3} l_n \bar{v} \tag{2}$$

式中 $l_n$ 为电子在 p 型区的平均自由程，$\bar{v}$ 为电子的平均热运动速度，故

$$L_n = \sqrt{D_n \tau_n} \qquad l_n = \bar{v}\tau_{ce} \tag{3}$$

将式(2)、式(3)代入式(1)得

$$J_s = [qN_c \bar{v}/(3r_e)^{1/2}]\exp[-q\Phi_b/k_0 T] \tag{4}$$

式中，$r_e = \tau_n/\tau_{ce}$。

按照热电子发射理论，对于肖特基二极管的反向饱和电流密度

$$\begin{aligned} J_{sT} &= A^* T^2 \exp(-q\Phi_{ns}/k_0 T) \\ &= A^* T^2 \exp(-q\Phi_b/k_0 T) \end{aligned} \tag{5}$$

根据麦克斯韦分布

$$\bar{v} = (8k_0 T/\pi m_n^*)^{1/2} \tag{6}$$

$$N_c = \frac{2(2\pi m_n^* k_0 T)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \tag{7}$$

则

$$\bar{v} N_c = \frac{16}{h^3}(k_0^2 T^2 m_n^* \pi) \tag{8}$$

且

$$A^* = 4\pi m_n^* q k_0^2 / k^2 \tag{9}$$

将式(8)代入式(5)，且利用式(9)得

$$J_{sT} = \frac{9}{4} N_c \bar{v} \exp(-q\Phi_b/k_0 T) \tag{10}$$

这样

$$\frac{J_{sT}}{J_s} = \frac{\frac{9}{4}N_c\bar{v}}{qN_c\bar{v}/\sqrt{3}(r_e)^{1/2}} = \frac{\sqrt{3}}{4}(r_e)^{1/2} = \frac{\sqrt{3}}{4}\left(\frac{\tau_n}{\tau_{ce}}\right)^{1/2}$$

即得证之。

**讨论**：对于 Si-pn 结，$\tau_n$ 的典型数值为 $10^{-6}$ s 左右，而 $\tau_{ce}$ 的值约为 $10^{-13}$ s 因此 $(r_e)^{\frac{1}{2}} > 10^3$。所以同一势垒高度的肖特基二极管其饱和电流密度比 Si-pn 结高出 $10^3$ 或更多。即使是少数载流子寿命短的半导体，如 GaAs 其比值小一些，但仍有 $10^2$ 的数量级。

# 第 8 章　半导体表面与 MIS 结构

**主题词**

表面态和界面态，MIS 结构，多子的堆积、耗尽和少子反型，弱反型、强反型、临界强反型，半导体表面电场、面电荷密度和电容，平带，平带电压，开启电压，耗尽层宽度、最大宽度、最小电容，$Si$-$SiO_2$ 系统，表面迁移率，冶金结、场感结，栅控二极管。

## 8.1　理论概要与重点分析

(1) 半导体总是存在表面的，表面情况与内部情况不同，对半导体表面性质和状况的研究，不仅能找出提高器件性能的方法，而且利用其表面特性，发展新型的半导体器件。

半导体表面结构，可以有三种情况：

① 清洁表面。它是一种表面没有任何污染、杂质和缺陷的理想表面。严格周期性排列的原子在这里中断，因此具有表面原子悬挂键。悬挂键上可得到或失去电子，其状态出现在表面禁带中，称为表面态。表面态的数目，与悬挂键数目相当，其密度约 $10^{15}/cm^2$ 个。

② 真实表面。表面与空气接触，会形成一薄的氧化层，同时还吸附一些杂质原子和离子。氧化层可以使内部表面悬挂键饱和一部分，使表面态密度相对清洁表面低，这种态出现在氧化层和半导体的界面，因而称为界面态，是快态。

③ 介质 -半导体系统。表面态的存在影响半导体内部性能和器件的稳定性。有氧化层存在时，其界面态减少。于是人为地在半导体表面生长一层介质，例如硅表面生长二氧化硅，它既可钝化半导体表面、降低界面态；又可作为扩散窗口进行选择扩散。

这种系统，也存在界面态，同时介质中还存在着各种电荷。这些电荷和态都会在半导体表面感应电荷，使半导体表面性能发生变化。

为对系统表面情况进行了解，我们利用一种叫做 MIS 结构的装置，它实际上是一个以半导体作为一个极板的平行板电容器。首先我们从理论上对一种理想 MIS 结构的半导体表面电场，面电荷密度，电容随外电压的变化作理论计算，然后分析实际结构中各种因素对表面参数的影响，再采用适当的测试方法，对结构中的电荷和界面态情况进行探求。

(2) 理想 MIS 结构半导体表面的电场，面电荷密度和电容。在理想 MIS 结构上加电压时，半导体表面空间电荷区 $x$ 处的电势满足一维泊松方程。

$$\frac{d^2V}{dx^2}=-\frac{\rho(x)}{\varepsilon_{rs}\varepsilon_0} \tag{8.1}$$

其中

$$\left.\begin{aligned}\rho(x) &= q(n_D^+ - p_A^- + p_p - n_p) \\ n_p &= n_{p0}e^{\frac{qV}{k_0T}} \\ p_p &= p_{p0}e^{-\frac{qV}{k_0T}} \\ n_D^+ - p_A^- &= n_{p0} - p_{p0}\end{aligned}\right\} \tag{8.2}$$

将式(8.2)代入式(8.1)可得

$$\frac{d^2V}{dx^2} = -\frac{q}{\varepsilon_{rs}\varepsilon_0}\left[p_{p0}(e^{-\frac{qV}{k_0T}} - 1) - n_{p0}(e^{\frac{qV}{k_0T}} - 1)\right] \tag{8.3}$$

两边乘以 $dV$ 再积分，得半导体表面处的电场

$$E_s = \pm\frac{2k_0T}{qL_D}F\left(\frac{qV_s}{k_0T},\frac{n_{p0}}{p_{p0}}\right) \tag{8.4}$$

利用高斯定理，表面电荷面密度

$$Q_s = \mp\frac{2\varepsilon_{rs}\varepsilon_0k_0T}{qL_D}F\left(\frac{qV_s}{k_0T},\frac{n_{p0}}{p_{p0}}\right) \tag{8.5}$$

表面电容

$$C_s = \frac{\varepsilon_{rs}\varepsilon_0}{L_D}\frac{\left[(-e^{-\frac{qV_s}{k_0T}} + 1) + \frac{n_{p0}}{p_{p0}}(e^{\frac{qV_s}{k_0T}} - 1)\right]}{F\left(\frac{qV_s}{k_0T},\frac{n_{p0}}{p_{p0}}\right)} \tag{8.6}$$

式中 $$F\left(\frac{qV_s}{k_0T},\frac{n_{p0}}{p_{p0}}\right) = \left[\left(e^{-\frac{qV_s}{k_0T}} + \frac{qV_s}{k_0T} - 1\right) + \frac{n_{p0}}{p_{p0}}\left(e^{\frac{qV_s}{k_0T}} - \frac{qV_s}{k_0T} - 1\right)\right]^{\frac{1}{2}} \tag{8.7}$$

称为 $F$ 函数；而

$$L_D = \left(\frac{2\varepsilon_{rs}\varepsilon_0k_0T}{q^2p_{p0}}\right)^{\frac{1}{2}} \tag{8.8}$$

为德拜长度；$V_s$ 为半导体表面势。

上面是外加电压从负到正整个变化范围对 p 型半导体推得的结果。为分析方便，我们分成几个典型的电压段和特殊点将式(8.4)～式(8.6)加以简化。实际上其简化主要是针对 $F$ 函数，只要把 $F$ 函数在各种情况下的简化值代入上面三式，就得到相应状态下三参量的对应值。附表(8-1)是以 p 型半导体为例的 MIS 结构结果，n 型情况是类似的，但应在符号上做相应的改变。

从表(8-1)表可见，从多子耗尽到表面达到临界强反型，其表达式都是耗尽状态的形式，只不过在不同的段和点表面势 $V_s$ 的取值不同。这部分结果在实际应用中尤显重要。

当外加电压加至使表面少子浓度大于表面多子浓度(例如 p 型半导体 $n_s > p_s$ )定义为表面少子反型。反型又有强反型和弱反型之分，当表面少子浓度大于多子浓度，而小于内部平衡多子浓度的范围称为弱反型( $V_B < V_s < 2V_B$ )；表面少子浓度大于内部平衡多子浓度的范围为强反型( $V_s > 2V_B$ )；表面少子浓度等于内部多子浓度，为强反型的临界状态，此时的半导体表面势(对 p 型)

表 8-1 p 型半导体不同表面状态下的各参量的公式

| 表面状态 | | 表面 $F$ 函数 $F_s$ | 表面电强度 $E_s$ | 表面电荷面密度 $Q_s$ | 表面空间电荷区的电容 $C_s$ |
|---|---|---|---|---|---|
| 多子堆积<br>$(V_G<0, V_s<0)$ | | $e^{-\frac{qV_s}{2k_0T}}$ | $-\frac{2k_0T}{qL_D}e^{-\frac{qV_s}{2k_0T}}$ | $\frac{2\varepsilon_r\varepsilon_0 k_0T}{qL_D}e^{\frac{qV_s}{2k_0T}}$ | $\frac{\varepsilon_{rs}\varepsilon_0}{L_D}e^{-\frac{qV_s}{2k_0T}}$ |
| 平带状态<br>$(V_G=0, V_s=0)$ | | 0 | 0 | 0 | $C_{FBS}=\frac{\sqrt{2}\varepsilon_{rs}\varepsilon_0}{L_D}$ |
| 多子耗尽<br>$(V_G>0)$<br>$(0<V_s<V_B)$ | | $\left(\frac{qV_s}{k_0T}\right)^{\frac{1}{2}}$ | $\frac{2}{L_D}\left(\frac{k_0T}{q}\right)^{\frac{1}{2}}(V_s)^{\frac{1}{2}}$ | $-(2qN_A\varepsilon_{rs}\varepsilon_0V_s)^{\frac{1}{2}}$ | $\left(\frac{N_Aq\varepsilon_{rs}\varepsilon_0}{2V_s}\right)^{\frac{1}{2}}-\frac{\varepsilon_{rs}\varepsilon_0}{X_D}$ |
| 表面本征状态<br>$(V_s=V_B)$ | | $\left(\frac{qV_s}{k_0T}\right)^{\frac{1}{2}}=\left(\frac{qV_B}{k_0T}\right)^{\frac{1}{2}}$ | $\frac{2}{L_D}\left(\frac{k_0T}{q}\right)^{\frac{1}{2}}(V_B)^{\frac{1}{2}}$ | $-(2qN_A\varepsilon_{rs}\varepsilon_0V_B)^{\frac{1}{2}}$ | $\left(\frac{N_Aq\varepsilon_{rs}\varepsilon_0}{2V_B}\right)^{\frac{1}{2}}$ |
| 反型状态<br>$(V_G>0,$<br>$V_s>V_B)$ | 弱反型<br>$(V_B<V_s<2V_B)$ | $\left(\frac{qV_s}{k_0T}\right)^{\frac{1}{2}}$ | $\frac{2}{L_D}\left(\frac{k_0T}{q}\right)^{\frac{1}{2}}(V_s)^{\frac{1}{2}}$ | $-(2qN_A\varepsilon_{rs}\varepsilon_0V_s)^{\frac{1}{2}}$ | $\left(\frac{N_Aq\varepsilon_{rs}\varepsilon_0}{2V_s}\right)^{\frac{1}{2}}$ |
| | 临界强反型<br>$(V_s=2V_B)$ | $\left(\frac{qV_s}{k_0T}\right)^{\frac{1}{2}}=\left(\frac{2qV_B}{k_0T}\right)^{\frac{1}{2}}$ | $\frac{2}{L_D}\left(\frac{k_0T}{q}\right)^{\frac{1}{2}}(2V_B)^{\frac{1}{2}}$ | $-(4qN_A\varepsilon_{rs}\varepsilon_0V_B)^{\frac{1}{2}}$ | $\left(\frac{N_Aq\varepsilon_{rs}\varepsilon_0}{4V_B}\right)^{\frac{1}{2}}$ |
| | 强反型<br>$(V_s>2V_B)$ | $\left(\frac{n_{p0}}{p_{p0}}\right)^{\frac{1}{2}}e^{\frac{qV_s}{2k_0T}}$ | $\left(n_s\frac{2k_0T}{\varepsilon_{rs}\varepsilon_0}\right)^{\frac{1}{2}}$ | $-(2k_0T\varepsilon_{rs}\varepsilon_0n_s)^{\frac{1}{2}}$ | $\frac{\varepsilon_{rs}\varepsilon_0}{L_D}\left(\frac{n_s}{p_{p0}}\right)^{\frac{1}{2}}$ |

其中，$n_s=n_{p0}e^{\frac{qV_s}{k_0T}}$，$V_B=\frac{k_0T}{q}\ln\frac{N_A}{n_i}$，耗尽层深度 $x_d=\left(\frac{2q\varepsilon_{rs}\varepsilon_0V_s}{qN_A}\right)^{\frac{1}{2}}$。

$$V_s = 2V_B = \frac{2k_0 T}{q}\ln\frac{N_A}{n_i} \tag{8.9}$$

这时表面反型少子的导电能力已足够强，称这时金属板上所加电压为开启电压（或阈值电压），用 $V_T$ 表示。理想 MIS 结构的开启电压

$$V_T = V_i + 2V_B = -\frac{Q_B}{C_i} + 2V_B \tag{8.10}$$

式中，$V_i$ 为绝缘层上压降，$Q_B$ 为临界强反型时半导体表面电荷密度，即

$$Q_B = -(4qN_A\varepsilon_{rs}\varepsilon_0 V_B)^{\frac{1}{2}}$$

绝缘层电容

$$C_i = \frac{\varepsilon_{ri}\varepsilon_0}{d_i}$$

(3) 理想 MIS 结构的 $C$-$V$ 特性。

MIS 结构的电容由两部分组成。其一是绝缘层电容 $C_i$，它是一个固定电容。其二是半导体表面空间电荷区的电容 $C_s$，它是随外加偏置电压而变化的可变电容。总电容为两者的串联。如用 $C_i$ 归一化，则总归一化电容

$$\frac{C}{C_i} = \frac{1}{1+\dfrac{C_s}{C_i}} \tag{8.11}$$

将 $C_s$ 和 $V_s$ 的关系代入上式，就得到 MIS 结构的电容与外加电压的关系，这个关系就是其 $C$-$V$ 特性。

在平带时（即 $V_G=0$），将 $C_s$ 的值代入式(8.11)，得平带归一化电容

$$\frac{C_{FB}}{C_i} = \frac{1}{1+\dfrac{\varepsilon_{ri}}{\varepsilon_{rs}}\left(\dfrac{\varepsilon_{rs}\varepsilon_0 k_0 T}{q^2 N_A d_i^2}\right)^{1/2}} \tag{8.12}$$

(4) 实际 MIS 结构中存在金属半导体的功函数差；绝缘层中有电荷，这些电荷可能为负，也可能为正；可能是固定的，也可能是可动的；可能是薄层，也可能是某种分布。此外在界面还存在界面态。在无外加电压时，它们会引起半导体表面电荷的变化，从而使理想 $C$-$V$ 特性发生变化。通过分析这些因素各自对 $C$-$V$ 特性如何影响，结合实际 $C$-$V$ 特性的测试结果（包括温度一偏压试验），可以探寻到这些量的存在，并测出其数值。

① 金属、半导体功函数差，使 $C$-$V$ 特性曲线沿电压轴平移，其平移量

$$V_{ms} = -\frac{W_m - W_s}{q} \tag{8.13}$$

② 绝缘层中的电荷，同样使 $C$-$V$ 特性曲线平移，设电荷密度在绝缘层中的分布为 $\rho(x)$。则其平移量

$$V_Q = \frac{Q_{ei}}{C_i} = \frac{1}{C_i}\int_0^{d_i}\frac{x\rho(x)}{d_i}\mathrm{d}x \tag{8.14}$$

其中

$$Q_{ei} = \int_0^{d_i}\frac{x\rho(x)}{d_i}\mathrm{d}x \tag{8.15}$$

是把绝缘层中某种分布的电荷等效为界面处薄层电荷的有效面电荷密度。为消除以上两者

的影响必须在 MIS 结构上加一个与其相反的电压，使半导体表面变为平带，即平带电压

$$V_{FB} = -V_{ms} - V_Q = -V_{ms} - \frac{Q_{ie}}{C_i} \tag{8.16}$$

平带电压，可以通过实测 $C\text{-}V$ 特性得出，从而确定 $V_{ms}$ 和 $Q_{ie}$。

如果这两者同时存在，要使 MIS 结构达到开启状态，其开启电压

$$V_T = V_{FB} + 2V_B - \frac{Q_B}{C_i} = -V_{ms} - \frac{Q_{ie}}{C_i} - \frac{Q_B}{C_i} + 2V_B \tag{8.17}$$

③ 界面态。与介质接触的半导体表面存在界面态。受主界面态接受电子后，带负电，施主界面态施放电子后带正电，均成为半导体表面电荷，对 $C\text{-}V$ 特性产生影响。但它与绝缘层中的电荷不同，它的电荷密度和带电性质都随表面能带变曲而发生变化，因此它的存在，不仅使 $C\text{-}V$ 曲线发生位移，而且使其形状发生变化。

界面态能级的位置，既可出现在禁带中某一确定位置，也可在禁带中出现某种连续分布，在同一 MIS 结构中，有的部分是施主型的，有的部分是受主型的，随能带弯曲可连续充放电。使 $C\text{-}V$ 曲线在某些区域出现台阶或使上升、下降的坡度变缓。

(5) 实际中用得最多的是 Si-$SiO_2$ 系统，经研究在这种系统中存在四种电荷或态。

① $SiO_2$ 中的可动电荷，主要是 $N^+a$，$K^+$ 离子，由于在外加偏压下可动，对器件的稳定性影响最大。

② $SiO_2$ 层中的固定正电荷，它在离硅表面 20nm 范围的 $SiO_2$ 中是由于其中过剩硅离子而形成的。

以上两者可用 $C\text{-}V$ 特性的温度—偏压试验将其区别开，并分别测出它们的面电荷密度。

③ 界面态，存在于 $SiO_2$、Si 界面处，是由其未被饱和的悬挂键、杂质和缺陷所引起。其能态在禁带中分布呈“U”形。靠近导带低和价带顶附近的密度高，禁带中部密度低。靠近价带顶附近为施主，导带底附近为受主。

④ $SiO_2$ 中的陷阱电荷。

(6) 半导体表面载流子的迁移率与体内不同，称为表面有效迁移率。它与内部迁移率约低一半。认为这是在表面电场作用下，产生的“镜反射”和“漫散射”作用引起的，有效迁移率与温度的关系和晶格散射相类似，$\mu_s \propto T^{-\frac{3}{2}}$。

(7) 表面电场对 pn 结性能的影响，主要表现于使反向电流增大，击穿电压降低，通常是用栅控二极管进行研究分析。

## 8.2 概念思考与练习题

**【8-1】** 半导体表面载流子积累、耗尽、本征和反型的物理意义是什么？

**【8-2】** 为什么 $SiO_2$ 层下面的 p 型硅表面有自行变为 n 型的倾向？

**【8-3】** 分别对 n 型衬底和 p 型衬底 MOS 结构，画出在外加偏压下对应于载流子在

积累、耗尽，强反型时能带和电荷分布图。

**【8-4】** 区别栅电压($V_G$)，阈值电压($V_T$)，平带电压($V_{FB}$)的不同，并说明它们之间的关系。

**【8-5】** 画出理想 MOS 结构电容器的等效电路图，写出其电容表达式(包括归一化电容的表达式)。

**【8-6】** 分别绘出理想 MOS 结构(n 型和 p 型衬底)的高频，低频电容－电压特性曲线，并逐段解释电容 $C$ 随电压变化的物理原因。

**【8-7】** 光照和温度变化对高频对 MOS 结构 $C$-$V$ 曲线有何影响，定性予以解释。

**【8-8】** 设在实际 MOS 结构中存在可动离子，固定电荷，快界面态，电离辐射陷阱和金一半功函数差，说明每种情况对 MOS 结构 $C$-$V$ 特性的影响。

**【8-9】** 说明平带电压 $V_{FB}$的物理意义？如何利用 $V_{FB}$和 $d_o$(氧化层厚度)的关系求金属一半导体功函数差。

**【8-10】** 在忽略界面态影响情况下，可以用什么试验方法测量 MOS 结构氧化层中固定电荷与可动电荷，说明试验方法并写出有关计算公式。

**【8-11】** 说明强反型状态出现以后，为什么栅电压 $V_G$ 的变化只能引起 $E_F$ 对表面能带相对位置很小的变化？

**【8-12】** 平衡态 $C$-$V$ 曲线和非平衡态 $C$-$V$ 曲线有何差别？为什么非平衡态的 $\frac{C}{C_0}$-$V_G$曲线是耗尽状态$\frac{C}{C_0}$-$V_G$ 曲线的延续？

**【8-13】** 从无定形 $SiO_2$ 薄膜的结构和钠离子性质，说明钠离子在 $SiO_2$ 中容易漂移的原因。

**【8-14】** 讨论界面态对 $C$-$V$ 曲线的影响。如图 8-1 所示曲线中分(a)，(b)，(c)三个区域讨论。

**【8-15】** 考虑温度的影响后，一个 p 型衬底 MOS 结构的 $C$-$V$ 曲线平移(如图 8-2 所示)，说明这一变化过程的物理因素。

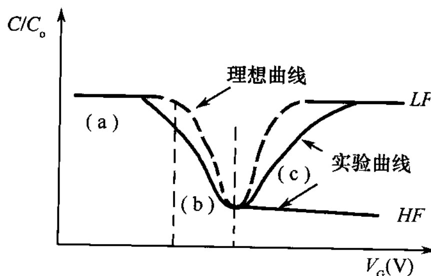



图 8-1 题 8-14 用图

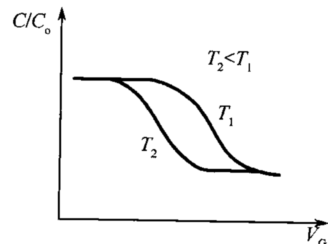



图 8-2 题 8-15 用图

**【8-16】** 实验发现，低温下MOS结构的阈压 $V_G$ 的变化速率刚好能跟上界面态发射电子的速率时，MOS 结构的 $C$-$V$ 曲线在耗尽区出现一段不随偏压变化的平坦部分，这一现象称为平台效应(如图 8-3 所示)。试定性解释这一现象。

**【8-17】** MOS结构(p型衬底)的高频 $C$-$V$ 曲线出现如图8-4所示的非正常现象。分析可能由哪些原因引起的?

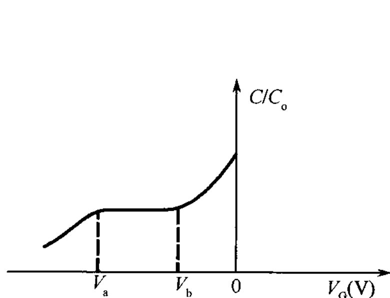



图8-3　题8-16用图

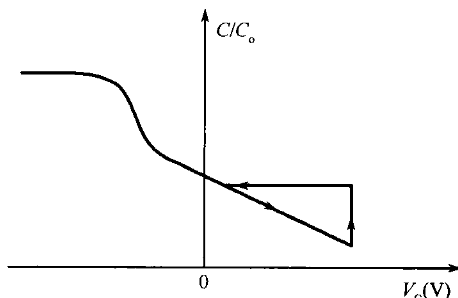



图8-4　题8-17用图

**【8-18】** 证明n型衬底MOS结构的阈值电压 $V_T$ 随温度变化有如下关系:

$$\frac{dV_T}{dT}=\frac{1}{T}\left(2-\frac{Q_s}{2C_0V_s}\right)\left(V_s-\frac{E_g}{2q}\right)$$

据此讨论阈值电压 $V_T$ 随温度增加是升高还是降低?衬底浓度和氧化层厚度如何影响 $V_T$ 的变化?

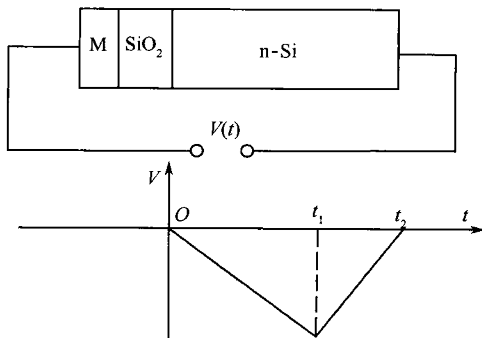



图8-5

**【8-19】** MOS结构的平带电容 $C_{FB}$ 的精确计算证明它小于氧化层电容 $C_0$,对此事实作一解释。

**【8-20】** 用耗尽近似方法推导半导体表面耗尽层的表面势,厚度和空间电荷的表示式。

**【8-21】** 图8-5所示是一个n型半导体的MOS电容器,在其上加一电压 $V(t)$,$V(t)$随时间的变化如图所示。试定性分析,电压 $V(t)$的变化率需满足什么条件时,才能保证由 $0\rightarrow t_1$ 时间内耗尽层宽度增加不受最大耗尽层宽度的限制(不考虑表面复合和击穿电压的影响),用能带说明在此情况下表面反型电荷何时达到极大值。

**【8-22】** 用掺杂浓度为 $N_D$ 的n型硅作衬底制成MOS电容器,测得其平带电压 $V_{FB}=0.14V$。根据下列所给的表面状态,把 $V_G-V_{FB}$ 和 $V_s$ 的具体表达式填入括号内,并注明其大于或小于0。

① 表面多子堆积状态:$V_G-V_{FB}$为(　　),$V_s$ 为(　　);

② 平带状态:$V_G-V_{FB}$为(　　),$V_s$ 为(　　);

③ 表面本征状态:$V_G-V_{FB}$为(　　),$V_s$ 为(　　);

④ 表面耗尽状态:$V_G-V_{FB}$为(　　),$V_s$ 为(　　);

⑤ 临界强反型状态：$V_G-V_{FB}$为(　　)，$V_s$ 为(　　)；

⑥ 强反型状态：$V_G-V_{FB}$为(　　)；$V_s$ 为(　　)。

**【8-23】** 对一 p 型衬底的 MOS 结构，在积累情况下，空间电荷区内的电荷密度近似为：

$$\rho(x)=qp_{p0}(e^{-\frac{qV}{k_0T}}-1)$$

根据泊松方程，导出积累情况下，空间电荷区电容 $C_S$ 和平带电容 $C_{FB}$的表达式。

# 8.3 典型例题解析

**【例 8-1】** 一金属板与 n 型硅相距 0.4$\mu$m，构成平行板电容器，其间的干燥空气的相对介电常数 $\varepsilon_{ra}=1$，当金属端加负电压时，半导体处于耗尽状态。(1)求耗尽层内电势的分布 $V(x)$。(2)求当 $V_s=0.4$V 时的耗尽层宽度 $X_d$ 和最大耗尽层宽度 $X_{dm}$ 的表达式；(3)如忽略金属与半导体的功函数差，求金属板上的电 $V_G$ 为多大时耗尽层宽度刚好达到最大值？( $N_D=10^{16}\ \text{cm}^{-3}$)

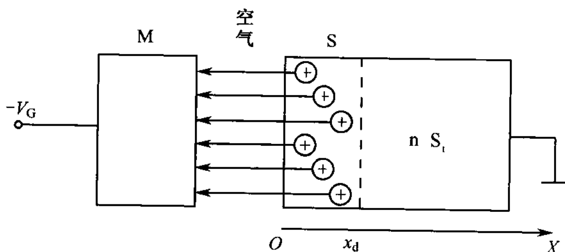



图 8 6　例 8-1 用图

**解：**(1) 根据耗尽层近似，空间电荷区的电荷密度为 $\rho(x)=qN_D$，故泊松方程可写为

$$\frac{d^2V}{dx^2}=-\frac{qN_D}{\varepsilon_{rs}\varepsilon_0} \tag{1}$$

因半导体内电场强度为零，并假设体内电势为零，则右边界条件

$$\varepsilon(x)\Big|_{x=x_d}=-\frac{dV}{dx}\Big|_{x=x_d=0} \tag{2}$$

$$V|_{x=x_d}=0 \tag{3}$$

则由 式(1)、式(2)和式(3)得

$$\frac{dV(x)}{dx}=-\frac{qN_D}{\varepsilon_{rs}\varepsilon_0}(x_d-x)$$

$$V(x)=-\frac{qN_D(x_d-x)^2}{2\varepsilon_{rs}\varepsilon_0}$$

当 $x=0$ 时，即为表面势 $V_s$，即

$$V_s=-\frac{qN_Dx_d^2}{2\varepsilon_{rs}\varepsilon_0}$$

(2) 耗尽层宽度 $X_d$ 为

$$X_d = \left[\frac{2\varepsilon_{rs}\varepsilon_0 V_s}{qN_D}\right]^{1/2} = \left[\frac{2\times 12\times 8.85\times 10^{-14}\times 0.4}{1.6\times 10^{-19}\times 10^{16}}\right]^{1/2} \tag{4}$$

$$= 2.3\times 10^{-5}(\text{cm}) = 0.23(\mu\text{m})$$

最大耗尽层宽度时的表面势 $V_{sm} = 2V_B$，即

$$V_{sm} = \frac{2k_0 T}{q}\ln\left(\frac{N_D}{n_i}\right) = 2\times 0.26\times \ln\frac{10^{16}}{1.5\times 10^{10}}$$

$$= 0.697(\text{V})$$

$$X_{dm} = \left(\frac{2\varepsilon_{rs}\varepsilon_0 V_{sm}}{qN_D}\right)^{1/2} = \left[\frac{2\times 12\times 8.85\times 10^{-14}\times 0.697}{1.6\times 10^{\ 19}\times 19^{16}}\right]^{1/2}$$

$$= 3.04\times 10^{-5}(\text{cm}) = 0.30(\mu\text{m})$$

(3) 当耗尽层达到最大值 $X_{dm}$ 时，半导体表面的电荷面密度 $Q_s = qN_D X_{dm}$，这时的栅压(M 上的电压)为 $V_G$，跨在空气隙上的电压是 $V_o$，空气电容 $C_0 = \varepsilon_{r0}\varepsilon_0/d_0$，

所以 $$V_G = V_{sm} + V_0 = V_{sm} + \frac{Q_s}{C_0}$$

$$- 0.697 + \frac{1.6\times 10^{-19}\times 10^{16}\times 3.04\times 10^{-5}\times 0.4\times 10^{\ 4}}{1\times 8.85\times 10^{-14}}$$

$$= 0.697 + 21.98 = 22.68(\text{V})$$

**【例 8-2】** 一个理想的 MOS 电容器，衬底是掺杂浓度 $N_A = 1.5\times 10^{15}/\text{cm}^3$ 的 p 型硅。若氧化层厚度是 0.1 μm 时，阈值电压 $V_T$ 为 1.1 V，问氧化层厚度为 0.2μm 时，$V_T$ 是多少？

**解：**

$$V_T = -\frac{Q_B}{C_0} + V_s$$

$$= -\left(\frac{Q_B}{\varepsilon_0\varepsilon_{ro}}\right)d_0 + 2V_B$$

由 $$V_{T1} = -\left(\frac{Q_B}{\varepsilon_0\varepsilon_{ro}}\right)d_{o1} + 2V_B$$

可得 $$-\frac{Q_B}{\varepsilon_0\varepsilon_{ro}} = \frac{V_{T1} - 2V_B}{d_{o1}}$$

所以 $$V_{T2} = -\left(\frac{Q_B}{\varepsilon_0\varepsilon_{ro}}\right)d_{o2} + 2V_B$$

$$= (V_{T1} - 2V_B)\frac{d_{o2}}{d_{o1}} + 2V_B$$

代入 $d_{o2}/d_{o1} = 2$，则 $$V_{T2} = 2V_{T1} - 2V_B$$

$$V_B = \frac{kT}{q}\ln\frac{N_A}{n_i}$$

$$= 0.026\times \ln\frac{1.5\times 10^{15}}{1.5\times 10^{10}}$$

$$= 0.30(\text{V})$$

故 $$V_{T2}=1.6(V)$$

**【例 8-3】** 一个 p 型半导体，受主密度 $N_A=1.04\times10^{16}\ /cm^3$，该半导体的禁带宽度 $E_v=1.12\ eV$，电子亲和势 $\chi=3.4\ eV$，在室温下测得它的功函数 $W=3.9\ eV$，求此时这块半导体的表面势 $V_S=?$ 设室温下价带有效状态密度 $N_v=1.04\times10^{19}\ /cm^3$。

**解**：半导体的功函数与半导体表面层是否存在势垒有关(势垒是由于垂直表面的电场或其他原因引起的)。如图 8-7 所示，当表面势 $V_s=0$ 时，即不存在势垒时，功函数 $W$ 为某一确定的数值；当 $V_s>0$ 时，功函数减小；而 $V_s<0$ 时，功函数增大。功函数的改变在数值上就等于势垒高度 $|qV_s|$。

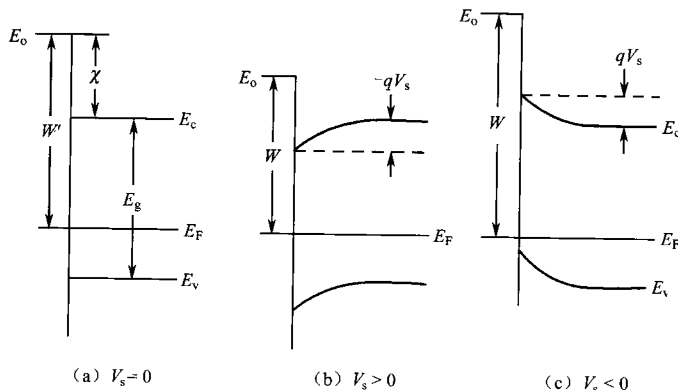



图 8-7 例 8-3 题用图

根据上面的分析，解决这个问题的方法可以先求出没有表面势垒存在时的功函数 $W'$，再把它与有势垒存在时的功函数 $W$ 相比较即可求得表面势 $V_s$。

为了求出 $W'$，先计算费米能级 $E_F$。设杂质全部电离

则
$$N_A=N_v\exp\left(-\frac{E_F-E_v}{k_0T}\right)$$

所以
$$E_F=E_v+k_0T\ln\frac{N_v}{N_A}$$
$$=E_v+0.026\times\ln\frac{1.04\times10^{19}}{1.04\times10^{18}}$$
$$=E_v+0.18(eV)$$

由图 8-7(a)可见

$$W'=\chi+E_g-(E_F-E_v)$$
$$=3.4+1.12-0.18$$
$$=4.34(eV)$$

由于测量的功函数 $W<W'$，所以可以断定 $V_s>0$。图 8-3 画出半导体表面层的能带图，并标出有关的数值。

由图 8-8 可见

$$qV_s = W' - W$$

所以
$$V_S = \frac{1}{q}(W' - W) = 4.34 - 3.9 = 0.4(\text{eV})$$

**【例 8-4】** 一个均匀掺杂的 n 型硅样品，施主密度 $N_D$ 为 $2.8\times10^{16}\text{cm}^{-3}$。设在样品表面存在受主型的表面态，它们相应的能级连续地、均匀地分布在价带顶和导带底之间，密度 $N_S$ 为 $6.0\times10^{11}\text{cm}^{-2}\cdot\text{eV}^{-1}$，试求出表面势 $V_s=?$

**解：** 受主型的表面态，未接受电子时，它们是电中性的。这时，半导体表面层中不出现空间电荷，能带是平直的，这是表面态与体内尚未达到平衡的情况，如图 8-9(a)所示。在热平衡情况下，在费米能级以下的能级基本上被电子占据。因此，体内电子将进入表面态，使半导体表面带负电，表面内的一层带正电，出现空间电荷区。能带弯曲的情况如图 8-9(b)所示。

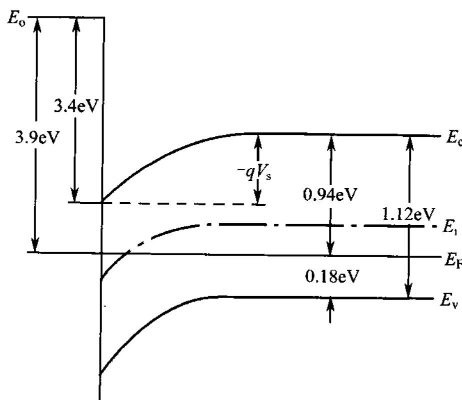



图 8 8　例 8-3 题用图

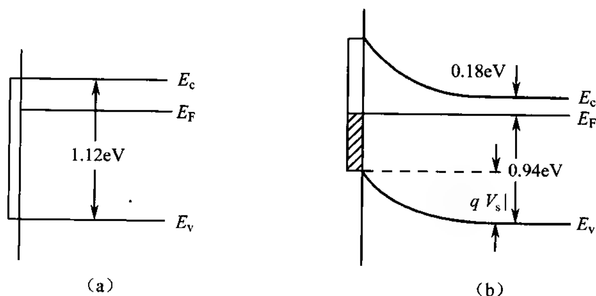



图 8-9　例 8-4 题用图

对于自由表面的情形，在达到热平衡时，表面的负电荷面密度应等于空间电荷区的正电荷面密度，即

$$Q_s = Q_{sc}$$

由图 8-9(b)可见

$$Q_s = qN_S[E_g - (E_c - E_F) - |qV_s|]$$

为了计算上的方便，上式方括号中的各量都是以电子伏为单位。以电子伏(eV)为单位表示 $q|V_s|$ 与以伏为单位表示 $|V_s|$ 的数值相同，因此式中可用 $|V_s|$ 代替 $q|V_s|$。设杂质全部电离

则
$$N_D = N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_F}{k_0 T}\right)$$

故
$$\begin{aligned} E_c - E_F &= k_0 T \ln \frac{N_c}{N_D} \\ &= 0.026 \times \ln \frac{2.8 \times 10^{19}}{2.8 \times 10^{18}} \\ &= 0.18(\text{eV}) \end{aligned}$$

于是

$$Q_s = qN_S(1.12 - 0.18 - |V_s|) \tag{1}$$

根据例 8-1(4)式，空间电荷区宽度

$$x_d = \left(\frac{2\varepsilon_0 \varepsilon_{rs}}{N_D q} |V_s|\right)^{1/2}$$

故
$$\begin{aligned} Q_{sc} &= N_D q x_d \\ &= (2N_D q \varepsilon_0 \varepsilon_{rs} |V_s|)^{1/2} \end{aligned} \tag{2}$$

由式(1)和式(2)得到

$$qN_S(0.94 - |V_s|) = (2N_D q \varepsilon_0 \varepsilon_{rs} |V_S|)^{1/2}$$

代入 $\varepsilon_0 = 8.85 \times 10^{-14}$ F/cm，$\varepsilon_{rs} = 12$ 和 $N_S, N_D$ 的值，得出关于 $|V_s|$ 的二次方程

$$|V_s|^2 - 2.91|V_s| + 0.94^2 = 0$$

该方程的解是

$$|V_s|_1 = 2.57 \text{ V}$$
$$|V_s|_2 = 0.35 \text{ V}$$

符合题意的解是 $|V_s|_2$，故

$$V_s = -0.35\text{V}$$

**【例 8-5】** 用 n 型硅单晶片作为衬底制成 MOS 结构。铝电极面积 $A = 1.6 \times 10^{-7}$ m²。在 150℃下进行负 B-T 和正 B-T 处理。分别测得如图 8-10 所示的 C-V 曲线(1)和(2)。求：在硅—二氧化硅界面处的正电荷面密度和二氧化硅中的可动离子的面密度。

**解：** 由图示的 C-V 曲线可查得

$$C_0 = 22(\text{pF}) \qquad C_{min} = 8.16(\text{pF})$$

(1) $SiO_2$ 层厚度为

$$\begin{aligned} d_0 &= \frac{A\varepsilon_0\varepsilon_r}{C_0} = \frac{1.6 \times 10^{-7} \times 8.85 \times 10^{-12} \times 3.9}{22 \times 10^{-12}} \\ &= 2.5 \times 10^{-7}(\text{m}) = 0.25\mu\text{m} \end{aligned}$$

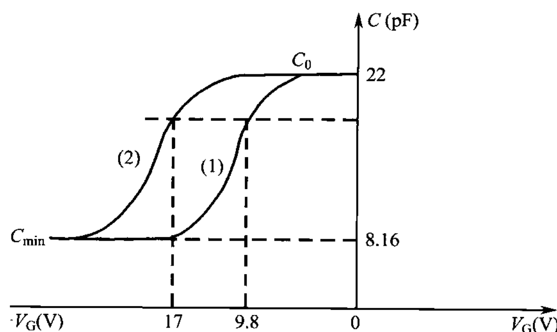



图 8-10　例 8-5 题用图

(2) 因为 $\frac{C_{min}}{C_0} = \frac{8.16}{22} = 0.371$，且

$$\left(\frac{C_{min}}{C_0}\right)^2 = \frac{1}{1 + \frac{2\varepsilon_{r0}}{q\varepsilon_{rs}d_0}\left[\frac{\varepsilon_{rs}\varepsilon_0 k_0 T}{N_D}\ln\left(\frac{N_D}{n_i}\right)\right]}$$

故可以代入计算，但相当麻烦。

另外一种方法是查阅有关曲线，见教材《半导体物理学》(第 7 版)253 页的图 8-12。可查得

$$N_D = 5 \times 10^{14}(1/\text{cm}^3)$$

(3) 由 $\frac{C_{FB}}{C_0} = \frac{1}{1 + \frac{\varepsilon_{r0}}{\varepsilon_{rs}}\left(\frac{\varepsilon_{rs} \cdot k_0 T}{q^2 N_A d_0^2}\right)^{\frac{1}{2}}}$ 可以计算，也可查阅教材《半导体物理学》(第 7 版)251 页的图 8-11 曲线，求得 $\frac{C_{FB}}{C_0} = 0.82$，所以

$$C_{FB} = 0.82C_0 = 0.82 \times 22 = 18(\text{pF})$$

(4) 已知：$W_s(N_D = 5 \times 10^{14}) = 4.30(\text{eV})$　　$W_{Al} = 4.20(\text{eV})$

所以

$$V_{ms} = -0.1(\text{V})$$

(5) 根据图中给出的曲线

$$V_{FB} = -17\ \text{V} \qquad V'_{FB} = -9.8(\text{V})$$

$$\Delta V_{FB} = V'_{FB} - V_{FB} = -9.8 + 17 = 7.2(\text{V})$$

因此 $N_{fc} = \frac{C_o}{A \cdot q}(V_{ms} - V'_{FB})$（即计算固定电荷密度比较严格的方法是从做过负温偏处理后测的 $C$-$V$ 特性来定 $V_{FB}$）

$$N_{fc} = \frac{C_o}{A \cdot q}(V_{ms} - V'_{FB})$$

$$= \frac{22 \times 10^{-12}}{1.6 \times 10^{-7} \times 1.6 \times 10^{-19}}(-0.1 + 9.8)$$

$$= 8.4 \times 10^{15}(\text{个}/\text{m}^2)$$

$$= 8.4 \times 10^{11}(\text{个}/\text{cm}^2)$$

计算可动离子面密度由正负温偏处理之间的 $V_{FB}$ 的偏移量来计算。

$$N_m = \frac{C_0 \Delta_{FB}}{A \cdot q} = \frac{22 \times 10^{-12}}{1.6 \times 10^{-7} \times 1.6 \times 10^{-19}} \times 7.2$$

$$\approx 6.2 \times 10^{15}(\text{个}/\text{m}^2) = 6.2 \times 10^{11}(\text{个}/\text{cm}^2)$$

**【例 8-6】** 试导出使表面恰为本征时表面电场强度，表面电荷密度和表面层电容的表达式(设 p 型硅情形)，如图 8-11 所示。

**解：** 当表面恰为本征时，即 $E_i$ 在表面与 $E_F$ 重合，故

$$V_s = V_B$$

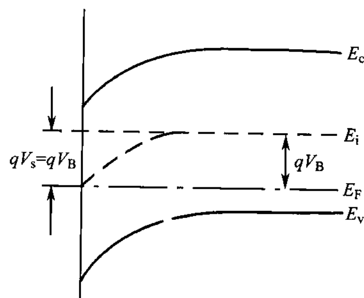



图 8-11　例 8-6 图

设表面层载流子浓度仍遵守经典统计。则

$$n_s = n_{p_0} e^{\frac{qV_B}{k_0 T}}$$

$$p_s = p_{p_0} e^{-\frac{qV_B}{k_0 T}}$$

因为，表面恰为本征，故有

$$n_s = p_s = n_i$$

故
$$\frac{n_{p_0}}{p_{p_0}} = e^{-\frac{2qV_B}{k_0 T}}$$

但
$$p_{p_0} = N_A, \quad \text{且} \quad n_{p_0} = \frac{n_i^2}{p_{p_0}} = \frac{n_i^2}{N_A}$$

故
$$\frac{n_{p_0}}{p_{p_0}} = \frac{n_i^2}{N_A^2} = e^{-\frac{2qV_B}{k_0 T}}$$

取对数即得

$$\frac{qV_B}{k_0 T} = \ln \frac{N_A}{n_i}$$

所以 $F$ 函数

$$F\left(\frac{qV_s}{k_0 T} \cdot \frac{n_{p_0}}{p_{p_0}}\right) = \left[\left(e^{\frac{qV_B}{k_0 T}} + \frac{qV_B}{k_0 T} - 1\right) + \frac{n_{p_0}}{p_{p_0}}\left(e^{\frac{qV_B}{k_0 T}} - \frac{qV_B}{k_0 T} - 1\right)\right]^{\frac{1}{2}}$$

又因为 p 型硅，且 $V_s = V_B$，所以有

$$qV_s = qV_B \gg k_0 T$$

故
$$e^{-\frac{qV_B}{k_0 T}} \ll 1, \qquad \frac{qV_B}{k_0 T} \gg 1$$

$$e^{-\frac{qV_B}{k_0 T}} \ll 1, \qquad \frac{n_{p_0}}{p_{p_0}} \ll 1$$

所以
$$F\left(\frac{qV_B}{k_0 T}, \frac{n_{p_0}}{p_{p_0}}\right) = \left(\frac{qV_B}{k_0 T}\right)^{\frac{1}{2}} = \left(\ln \frac{N_A}{n_i}\right)^{\frac{1}{2}}$$

因此
$$\varepsilon_s = \frac{2k_0 T}{qL_D} F\left(\frac{qV_s}{k_0 T}, \frac{n_{p_0}}{p_{p_0}}\right) = \frac{2k_0 T}{qL_D}\left(\ln \frac{N_A}{n_i}\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$Q_s = -\frac{2\varepsilon_{rs}\varepsilon_0 k_0 T}{qL_D} F\left(\frac{qV_s}{k_0 T}, \frac{n_{p_0}}{p_{p_0}}\right) = -\frac{2\varepsilon_{rs}\varepsilon_0 k_0 T}{qL_D}\left(\ln\frac{N_A}{n_i}\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$C_s = \left|\frac{dQ_s}{dV_s}\right| = \frac{\varepsilon_{rs}\varepsilon_0}{L_D} \frac{\left[(-e^{-\frac{qV_B}{k_0 T}} + 1) + \frac{n_{p_0}}{p_{p_0}}(e^{\frac{qV_B}{k_0 T}} - 1)\right]}{F\left(\frac{qV_B}{k_0 T}, \frac{n_{p_0}}{p_{p_0}}\right)}$$

故

$$C_s = \frac{\varepsilon_{rs}\varepsilon_0}{L_D} \frac{1}{\left(\ln\frac{N_A}{n_i}\right)^{\frac{1}{2}}}$$

**【例 8-7】** 一电阻率为 3Ω·cm，n 型硅样品，使其表面开始出现强反型，试求表面空间电荷区中恰好为本征的位置与空间电荷区边界的距离。硅的相对介电常数 $\varepsilon_{rs}=12$，$\mu_n=1350\text{cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$。

**解：** n 型半导体开始出现强反型时的能带图，如图 8-12 所示。

设在空间电荷区中恰好为本征的位置为 $x_i$，该点的电势为

$$V(x_i) = -\frac{N_D q}{2\varepsilon_0\varepsilon_{rs}} \cdot (x_i - x_d)^2$$

由此得出 $x_i$ 点与空间电荷区边界的距离

$$x_d - x_i = \left[\frac{2\varepsilon_0\varepsilon_{rs}\,|V(x_i)|}{qN_D}\right]^{1/2}$$

由图 8-12 可以看出

$$V(x_i) = -\frac{1}{q}(E_F - E_{i0})$$

而

$$N_D = n_i \exp\left(\frac{E_F - E_{i0}}{kT}\right)$$

所以

$$x_d - x_i = \left(\frac{2\varepsilon_0\varepsilon_{rs}}{qN_D} \cdot \frac{kT}{q}\ln\frac{N_D}{n_i}\right)^{1/2}$$

只考虑一种载流子（电子）的导电作用，则

$$N_D = \frac{1}{\rho q \mu_n} = \frac{1}{3\times 1.6\times 10^{-19}\times 1350}$$
$$\approx 1.5\times 10^{15}(\text{cm}^{-3})$$

$$x_d - x_i = \left(\frac{2\times 8.85\times 10^{-14}\times 12\times 0.026}{1.5\times 10^{15}\times 1.6\times 10^{-19}} \times \ln\frac{1.5\times 10^{15}}{1.5\times 10^{10}}\right)^{1/2}$$
$$\approx 1.5\times 10^{-5}(\text{cm})$$

**【例 8-8】** 导出理想 MIS 结构的开启电压随温度变化的关系式。

**解：** 以 p-Si 为例，如图 8-13 所示。设开启电压为

$$V_T = V_0 + V_s$$

式中，$V_0$ 为绝缘层上的压降；$V_s$ 为半导体表面空间电荷区压降。则

$$V_T = -\frac{Q_s}{C_0} + V_s$$

半导体表面空间电荷区出现反型态，则其表面负电荷应由两部分组成：

① 电离受主电荷 $Q_A = -qN_A x_{dm}$，$x_{dm}$ 为空间电荷区宽度；

② 反型电子 $Q_n$。

可以证明：在开启时 $Q_A \gg Q_n$，所以，半导体表面空间电荷区的电荷为耗尽层最大电荷。



图 8-12　例 8-7 题用图



图 8-13　例 8-8 题用图

即
$$Q_s = -\frac{2\varepsilon_{rs}\varepsilon_0}{L_D}\left(\frac{k_0 T}{q}\right)^{\frac{1}{2}}(V_s)^{\frac{1}{2}}$$

式中
$$L_D = \left(\frac{2\varepsilon_{rs}\varepsilon_0 k_0 T}{q^2 p_{p_0}}\right)^{\frac{1}{2}} = \left(\frac{2\varepsilon_{rs}\varepsilon_0 k_0 T}{q^2 N_A}\right)^{\frac{1}{2}}$$

又因为
$$V_s = 2V_B = \frac{2k_0 T}{q}\ln\frac{N_A}{n_i}$$

故
$$Q_s = -\frac{2\varepsilon_{rs}\varepsilon_0}{\left(\frac{2\varepsilon_{rs}\varepsilon_0 k_0 T}{q^2 N_A}\right)^{\frac{1}{2}}}\left(\frac{k_0 T}{q}\right)^{\frac{1}{2}}\left(\frac{2k_0 T}{q}\ln\frac{N_A}{n_i}\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$= -\sqrt{4\varepsilon_{rs}\varepsilon_0 k_0 T N_A \ln\frac{N_A}{n_i}}$$

所以
$$V_T = V_0 + V_s = -\frac{Q_s}{C_0} + V_s$$

$$= \frac{\left[4\varepsilon_{rs}\varepsilon_0 k_0 T N_A \ln\frac{N_A}{n_i}\right]^{\frac{1}{2}}}{C_0} + \frac{2k_0 T}{q}\ln\frac{N_A}{n_i}$$

**【例 8-9】** 试计算下列情况下，平带电压的变化。

(1) 氧化层中均匀分布着正电荷；

(2) 三角形电荷分布，金属附近高，硅附近为零；

(3) 三角形电荷分布，硅附近高，金属附近为零。

设三种情况下，单位表面积的总离子数都为 $10^{12}/\text{cm}^2$。氧化层厚度均为 $0.2\mu\text{m}$；$\varepsilon_{r_0}=3.9$，$\varepsilon_0=8.85\times10^{\ 14}\text{F/cm}$。

**解：**

(1) 设氧化层中电荷密度为 $\rho_0$（如图 8-14 所示）；所以

$$\mathrm{d}V_{FB}=-\frac{x\mathrm{d}Q}{d_0C_0}=-\frac{\rho_0x\mathrm{d}x}{d_0C_0}\text{（单位面积）}$$

则
$$V_{FB}=-\frac{1}{C_0\mathrm{d}_0}\int_0^{d_0}\rho_0x\mathrm{d}x=-\frac{\rho_0}{C_0d_0}\frac{x^2}{2}\bigg|_0^{d_0}=-\frac{\rho_0d_0}{2C_0}$$

又因为
$$Q=\int_0^{d_0}\rho_0\mathrm{d}x=\rho_0d_0=10^{12}\times1.6\times10^{-13}(\text{C/cm}^3)$$

所以
$$\rho_0=\frac{10^{12}\times1.6\times10^{-19}}{d_0}$$

又因为
$$C_0=\frac{\varepsilon_{r_0}\varepsilon_0}{d_0}$$

故
$$\begin{aligned}V_{FB}&=-\frac{d_0}{2C_0}\times\frac{10^{12}\times1.6\times10^{\ 19}}{d_0}\\&=-\frac{d_0}{2\varepsilon_{r_0}\varepsilon_0}\times10^{12}\times1.6\times10^{\ 19}\\&=-\frac{0.2\times10^{-4}}{2\times3.9\times8.85\times10^{-14}}\times10^{12}\times1.6\times10^{-19}\\&=-4.6(\text{V})\end{aligned}$$

(2) 三角形电荷分布，金属附近为高，硅附近为零，如图 8-15 所示。

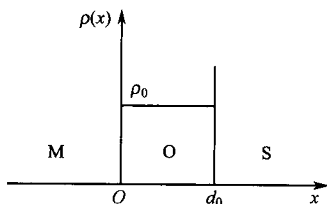



图 8-14 例 8-9(1)题用图

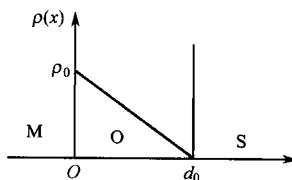



图 8-15 例 8-9(2)题用图

设 M-O 边界为 $x$ 坐标的原点，则

$$\rho(x)\big|_{x-0}=\rho_0$$

所以
$$\rho(x)=\rho_0-\frac{\rho_0}{d_0}x$$

故单位面积氧化层中总电荷为

$$Q=\int_0^{d_0}\left(\rho_0-\frac{\rho_0}{d_0}x\right)\mathrm{d}x=\rho_0d-\frac{\rho_0}{d_0}\int^{d_0}x\mathrm{d}x$$

$$= \frac{1}{2}\rho_0 d_0 = 10^{12} \times 1.6 \times 10^{-19} (\mathrm{C/cm^2})$$

且
$$V_{FB} = -\frac{Q}{C_0 d_0} = -\frac{1}{C_0 d_0}\int_0^d \left(\rho_0 - \frac{\rho_0}{d_0}x\right)x\,dx$$

$$= -\frac{1}{C_0 d_0}\left(\frac{1}{2}\rho_0 d_0^2 - \frac{\rho_0}{3d_0}d_0^3\right)$$

$$= -\frac{1}{C_0 d_0}\left(\frac{1}{2}\rho_0 d_0^2 - \frac{1}{3}\rho_0 d_0^2\right) = -\frac{\rho_0 d_0^2}{6C_0 d_0}$$

又因为
$$C_0 = \frac{\varepsilon_{r_0}\varepsilon_0}{d_0}$$

所以
$$V_{FB} = -\frac{\rho_0 d_0^2}{6\varepsilon_{r0}\varepsilon_0}$$

代入数据得

$$V_{FB} = \frac{2 \times 10^{12} \times 1.6 \times 10^{-19} \times 0.2 \times 10^{-4}}{6 \times 8.85 \times 10^{-14} \times 3.9}$$

$$= -\frac{2 \times 1.6 \times 0.2}{6 \times 8.85 \times 3.9} \times 10^3$$

得
$$V_{FB} = -3.1(\mathrm{V})$$

(3) 三角形电荷分布，硅附近高，金属附近为零，如图 8-16 所示。

$$\rho(x)\big|_{x-d_0} = \rho_0$$

则
$$\rho(x) = \frac{\rho_0}{d_0}x$$

所以 $Q = \int_0^{d_0} \rho(x)\,dx$

$$= \frac{1}{2}\rho_0 d_0 = 10^{12} \times 1.6 \times 10^{-19} (\mathrm{C/cm^2})$$

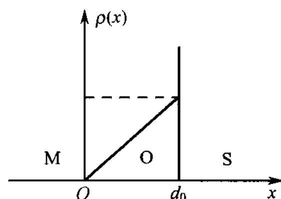


图 8-16 例 8-9(3)题用图

$$V_{FB} = -\frac{1}{C_0 d_0}\int_0^{d_0} \rho(x)x\,dx = -\frac{1}{C_0 d_0}\int_0^{d_0} x\,\frac{\rho_0}{d_0}x\,dx$$

$$= -\frac{\rho_0 d_0^2}{3C_0 d_0} = -\frac{\rho_0 d_0^2}{3\varepsilon_{r0}\varepsilon_0}$$

代入数据得

$$V_{FB} = -\frac{2 \times 10^{12} \times 1.6 \times 10^{-19} \times 0.2 \times 10^{-4}}{3 \times 3.9 \times 8.85 \times 10^{-14}}$$

$$= -6.2(\mathrm{V})$$

**【例 8-10】** 一 MOS 结构中 $SiO_2$ 层的厚度为 $d_0 = 2000$ nm，其中电荷密度分布分别为：(1) $\rho(x) = \rho_0 \exp(-x/l)$，(2) $\rho(x) = \rho_0 \mathrm{sh}(x/d_0)$，试推导出由此空间电荷引起的

$V_{FB}$变化的表达式。若在(1)中 $l = 2d_0, \rho_0 = qN, N = 10^{16}\ /cm^3$,求(1)、(2)两种情况下 $V_{FB}$变化的数值。

**解:** 当 MOS 结构的绝缘层中存在电荷时可引起 $C$-$V$ 特性曲线沿电压轴的平移。平带电压的平移量与绝缘层中电荷分布的关系分别为

$$V_{FB}^{(1)} = -\frac{1}{C_0 d_0}\int_0^{d_0} x\rho_0 \exp(-x/l)\,dx$$

$$V_{FB}^{(2)} = -\frac{1}{C_0 d_0}\int_0^{d_0} x\rho_0 \,\mathrm{sh}(x/d_0)\,dx$$

如题中所给定,若 $l = 2d_0, \rho = qN = 1.6\times10^{-3}\ C/cm^3$ 及 $SiO_2$ 的相对介电常数为 3.9,由上式得

$$V_{FB}^{(1)} = -\frac{\rho_0}{C_0 d_0}\int_0^{d_0} x e^{-x/l}\,dx = -6.7\times10^{-5}(V)$$

同理得

$$V_{FB}^{(2)} = -\frac{\rho_0}{C_0 d_0}\int_0^{d_0} x\,\mathrm{sh}\frac{x}{d_0}\,dx = -6.82\times10^{-5}(V)$$

**【例 8-11】** 以 p 型衬底为例证明由空间电荷区边界 $x_d$ 处开始电势按抛物线方式上升,即

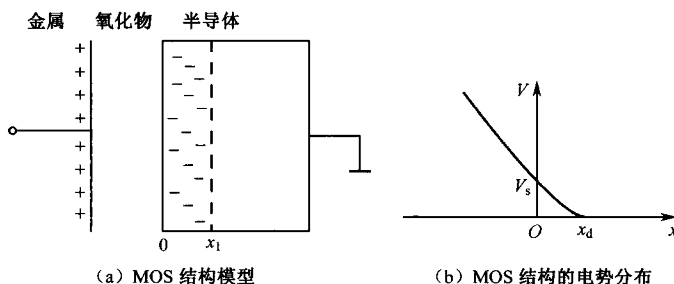
$$V(x) = V_s\left(1-\frac{x}{x_d}\right)^2$$

式中

$$V_s = \frac{qN_A x_d^2}{2\varepsilon_0\varepsilon_r}$$

**证明:** 如图 8-17(a)所示的 MOS 结构,在空间电荷区内的电势分布由泊松方程

$$\frac{d^2V}{dx^2} = -\frac{\rho}{\varepsilon_0\varepsilon_r} \tag{1}$$



(a) MOS 结构模型　　(b) MOS 结构的电势分布

图 8-17　MOS 结构与表面空间电荷区电势分布

决定。式中 $\rho$ 是电荷密度。

对 p 型衬底,令 $N_A$ 为受主杂质浓度,在耗尽层近似下电荷密度

$$\rho = -N_A q \tag{2}$$

将式(2)代入式(1)得

$$\frac{d^2V}{dx^2}=\frac{N_A q}{\varepsilon_0\varepsilon_r}$$

积分一次得

$$\mathscr{E}(x)=-\frac{dV}{dx}=-\frac{N_A q}{\varepsilon_0\varepsilon_r}x+C$$

选 $x_d$ 处电势为零，该处电场也为零，即当 $x=x_d$ 时 $\mathscr{E}(x_d)=0$，故

$$C=\frac{N_A q}{\varepsilon_0\varepsilon_r}x_d$$

于是得

$$\mathscr{E}(x)=\frac{N_A q}{\varepsilon_0\varepsilon_r}(x_d-x) \tag{3}$$

电场强度指向 $x$ 的正方向。在 $x=0$ 处电场强度取最大值

$$\mathscr{E}_{max}=\frac{N_A q}{\varepsilon_0\varepsilon_r}x_d$$

由式(3)可得

$$V(x)-V(x_d)=\int_x^{x_d}\mathscr{E}(x)dx$$

由于 $V(x_d)=0$，所以得

$$V(x)=\frac{N_A q}{\varepsilon_0\varepsilon_r}\int_x^{x_d}(x_d-x)dx=V_s\left(1-\frac{x}{x_d}\right)^2 \tag{4}$$

式中 $V_S=\frac{N_A q}{2\varepsilon_0\varepsilon_r}x_d^2$。

式(4)表示电势由空间电荷区的边界 $x_d$ 处开始按抛物线方式上升，如图 8-17(b)所示。

**【例 8-12】** 若在禁带中心 $E_i$ 存在单能级的快界面态（即 $E_t=E_i$），其密度为 $N_{st}\text{cm}^{-2}$。设载流子填充快界面态遵从费米统计分布，试证明界面态电容 $C_{ss}(V_s)$ 为

$$C_{ss}=\frac{q^2N_{st}}{k_0T}\frac{e^{\beta}}{(1+e^{\beta})^2}$$

式中

$$\beta=\frac{E_i-E_F-qV_s}{k_0T}$$

**证明：** 在表面层由于电势的变化，使能带发生弯曲陷阱能级 $E_t$ 变为 $E_{ts}$（如图 8-18 所示）。由于（$E_{cs}-E_{ts}$）的值是电子从表面态发射至导带所需要的能量，所以它与能带的弯曲有关，故 $E_{ts}=E_t-qV_s$。

若忽略表面态中电子的简并化，且假定每个状态中电荷只有两个可能的值，且只相差一个电子，那么表面态被电子占据的几率 $f_t$ 由费米分布给出。

$$f_t=\frac{1}{1+\exp\left(\frac{E_{ts}-E_F}{k_0T}\right)}$$

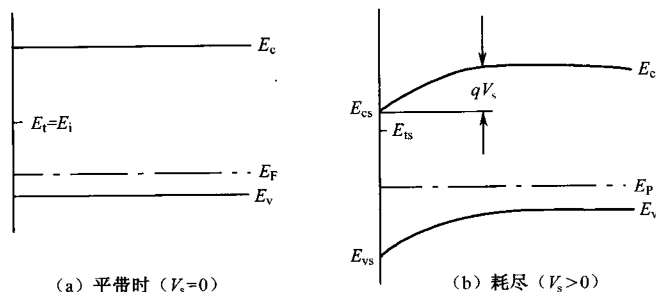



图 8-18　表面空间电荷区内能带

因为 $E_{ts} = E_t - qV_s$，所以

$$f_t = \frac{1}{1+\exp\left(\dfrac{E_t - qV_s - E_F}{k_0 T}\right)} = \frac{1}{1+\exp\left(\dfrac{E_i - E_F - qV_s}{k_0 T}\right)}$$

对于受主型表面态其电荷量：$Q_{ss} = -qN_{st} f_t$；

对于施主型表面态其电荷量：$Q_{ss} = +qN_{st}(1-f_t)$。

显然，不管表面态的类型如何（施主或受主），都应有

$$\frac{dQ_{ss}}{dV_s} = -qN_{st}\frac{df_t}{dV_s}$$

$$\frac{df_t}{dV_s} = \frac{d}{dV_s}\left[\frac{1}{1+\exp\left(\dfrac{E_i - E_F - qV_s}{k_0 T}\right)}\right]$$

$$= -q\frac{\exp\left(\dfrac{E_i - E_F - qV_s}{k_0 T}\right)}{1+\exp\left(\dfrac{E_i - E_F - qV_s}{k_0 T}\right)^2}$$

表面态微分电容

$$C_{ss} = \frac{dQ_{ss}}{dV_s} = -qN_{st}\frac{df_t}{dV_s}$$

$$= \frac{q^2 N_{st}}{k_0 T}\frac{\exp\left(\dfrac{E_i - E_F - qV_s}{k_0 T}\right)}{1+\exp\left(\dfrac{E_i - E_F - qV_s}{k_0 T}\right)^2}$$

令
$$\beta = \frac{E_i - E_F - qV_s}{k_0 T}$$

则
$$C_{ss} = \frac{q^2 N_{st}}{k_0 T}\frac{e^{\beta}}{(1+e^{\beta})^2}$$

即得证。

**【例 8-13】** 金属-$SiO_2$-Si(p 型)构成的 MOS 结构电容器，设空穴浓度 $N_A = 1.5 \times 10^{15}\ cm^{-3}$，$SiO_2$ 层厚度 $d_0 = 0.2\ \mu m$，其相对介电系数 $\varepsilon_{r_0} = 3.9$，硅的相对介电系数 $\varepsilon_{rs} =$

$12, \varepsilon_0 = 8.85 \times 10^{-14}$ F/cm，室温下 $n_i = 1.5 \times 10^{10}\ \text{cm}^{-3}$。

（1）设为理想的 MOS 结构，求开启电压 $V_T$。

（2）设 $SiO_2$ 与硅界面处存在固定正电荷，测得 $V_T = 2.6$V 求单位面积固定正电荷数（略去功函数差的影响）；

（3）如果上述这些正电荷均匀分布于 $SiO_2$ 中，则测得的 $V_T$ 为多少？（略去功函数差的影响）；

（4）若这些正电荷在 $SiO_2$ 中呈抛物线分布（如图8-19所示），则测得的开启电压 $V_T$ 为多少？

**解：**

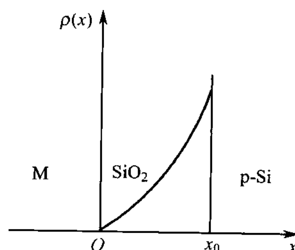


图 8 19　例 8-13(4)题用图

（1）当表面势 $V_s = 2V_B$ 时，金属板上所加的电压称为开启电压。

$$V_T = V_0 + V_s = -\frac{Q_s}{C_0} + 2V_B = -\frac{Q_s}{C_0} + 2\frac{k_0 T}{q}\ln\frac{N_A}{n_i}$$

式中，$Q_s = -qN_A x_{dm}$ 为表面耗尽电荷，其中

$$x_{dm} = \sqrt{\frac{4\varepsilon_{rs}\varepsilon_0 V_B}{qN_A}}$$

所以

$$Q_s = -\sqrt{qN_A \cdot 4\varepsilon_{rs}\varepsilon_0 V_B}$$

$$V_B = \frac{k_0 T}{q}\ln\frac{N_A}{n_i} = 0.026\ln\frac{1.5\times10^{15}}{1.5\times10^{10}} = 0.36(\text{V})$$

故

$$Q_s = -\sqrt{1.6\times10^{-19}\times1.6\times10^{16}\times4\times12\times8.85\times10^{-14}\times0.36}$$
$$= -6.05\times10^{-8}(\text{C})$$

$$C_0 = \frac{\varepsilon_{r_0}\varepsilon_0}{d_0} = \frac{3.9\times8.85\times10^{-14}}{0.2\times10^{-4}}$$
$$= 1.72\times10^{-8}(\text{F/cm}^2)$$

所以

$$-\frac{Q_s}{C_0} = \frac{6.05\times10^{-8}}{1.72\times10^{-8}} = 3.5(\text{V})$$

$$2V_B = 2\times0.36 = 0.72\ \text{V}$$

开启电压

$$V_T = -\frac{Q_s}{C_0} + 2V_B = 3.5 + 0.72$$
$$= 4.22(\text{V})$$

（2）因为 Si-$SiO_2$ 界面上存在正电荷有利于 p 型衬底反型，所以开启电压减少。即

$$\Delta V_T = \frac{Q_{fc}}{C_0}$$

所以

$$Q_{fc} = C_0 \cdot \Delta V_T = 1.72 \times 10^{-8}(4.22 - 2.6)$$
$$= 2.79 \times 10^{-8}(\text{C})$$

$$N_{fc} = \frac{Q_{fc}}{q} = \frac{2.79 \times 10^{-8}}{1.6 \times 10^{-19}} = 1.74 \times 10^{11}(\text{个}/\text{cm}^2)$$

(3) 因为正电荷均匀分布在 $SiO_2$ 层中，因此电荷密度 $\rho_0$ 为

$$\rho_0 = \frac{Q_{fc}}{d_0} = \frac{2.79 \times 10^{-8}}{0.2 \times 10^{-4}} = 1.4 \times 10^{-3}(\mathrm{C/cm^3})$$

略去功函数差的影响

$$V_{FB} = -\frac{1}{C_0}\int_0^{d_0} \frac{x\rho_0 \mathrm{d}x}{d_0} = -\frac{\rho_0}{2C_0 d_0} d_0^2$$

$$= -\frac{\rho_0 d_0}{2C_0} = -\frac{1.4 \times 10^{-3} \times 2 \times 10^{-5}}{2 \times 1.72 \times 10^{-8}}$$

$$= -\frac{2.8 \times 10^{-8}}{3.44 \times 10^{-6}} = -0.81(\mathrm{V})$$

由于这些均匀分布在 $SiO_2$ 层中正电荷的影响，可以使开启电压 $V_T$ 减少 0.81V。故此时测得

$$V_T = 4.22 - 0.81 = 3.41(\mathrm{V})$$

(4) 由前面计算已知 $Q_{fc} = 2.79 \times 10^8$ (C)

$$Q_{fc} = \int_0^{d_0} \rho(x)\mathrm{d}x = \int_0^{d_0} ax^2 \mathrm{d}x = \frac{a}{3} d_0^3$$

求得 $a = \frac{3Q_{fc}}{d_0^3}$。故

$$\rho(x) = \frac{3Q_{fc}}{d_0^3} x^2$$

在这些正电荷的影响下，且略去功函数差，则平带电压变化量

$$V_{FB} = -\frac{1}{C_0 d_0}\int_0^{d_0} x\rho(x)\mathrm{d}x$$

$$= \frac{-1}{C_0 d_0} x \cdot \frac{3Q_{fc}}{d_0^3} \cdot \int_0^{d_0} x^3 \mathrm{d}x$$

$$= -\frac{3}{4} \frac{Q_{fc}}{C_0 d_0^4} x^4 \Big|_0^{d_0} = -\frac{3Q_{fc}}{4C_0} = -\frac{3 \times 2.79 \times 10^{-8}}{4 \times 1.72 \times 10^{-8}} = -1.22(\mathrm{V})$$

开启电压

$$V_T = 4.22 - 1.22 = 3(\mathrm{V})$$

**【例 8-14】** 一栅控 $p^+n$ 二极管的冶金结面积为 $10^{-3}\mathrm{cm^2}$，栅极与 n 区重叠面积为 $10^{-3}\mathrm{cm^2}$，衬底杂质浓度为 $10^{16}\mathrm{cm^{-3}}$，结深为 $5\mu\mathrm{m}$，氧化层厚度为 $0.2\mu\mathrm{m}$，寿命 $\tau = 1\mu\mathrm{s}$，表面复合速度 $s_0 = 5\mathrm{cm/s}$，平带电压为 $-2$V。试计算：

(1) 衬底表面分别为本征和强反型时的栅电压（室温下结电压为零时）；

(2) $V_G = 0, -20$V 的条件下，$V_R = 1$V 时室温下的反向电流。

(3) 在与(2)题同样的栅压下，$V_F = 0.4$V 时的正向电流，并求出反向电流，正向电流和栅电压的函数关系。

**解：** (1) 栅电压 $V_G = V_s + V_0 + V_{FB}$，衬底恰为本征

$$V_s = V_B = \frac{E_i - E_F}{q}$$

设杂质全部电离

$$n_0 = N_D$$

$$N_D = n_0 = n_i e^{-\frac{E_i - E_F}{k_0 T}}$$

所以

$$V_s = \frac{E_i - E_F}{q} = -\frac{k_0 T}{q} \ln \frac{n_0}{n_i}$$

$$= \frac{-0.026}{q} \ln \frac{10^{16}}{1.5 \times 10^{10}} \approx -0.35(\mathrm{V})$$

$SiO_2$ 层中的压降为

$$V_0 = -\frac{Q_s}{C_0}$$

在表面耗尽状态，其电荷为

$$Q_s = qN_D x_d = qN_D \sqrt{\frac{2\varepsilon_{rs}\varepsilon_0(-V_s)}{qN_D}}$$

即

$$Q_s = [2\varepsilon_{rs}\varepsilon_0 qN_D(-V_s)]^{\frac{1}{2}}$$

所以

$$V_0 = -\frac{Q_s}{C_0} = -\frac{d_0}{\varepsilon_{rs}\varepsilon_0}[2\varepsilon_{rs}\varepsilon_0 qN_D(-V_s)]^{\frac{1}{2}}$$

代入数据

$$V_0 = \frac{0.2 \times 10^{-4}}{3.9 \times 8.85 \times 10^{-14}}(2 \times 11.6 \times 8.85 \times 10^{-12} \times 10^{22} \times 0.35 \times 1.6 \times 10^{-19})^{\frac{1}{2}}$$

$$= -\frac{0.2 \times 10^{-4}}{34.5 \times 10^{-14}} \times (2.32 \times 8.85 \times 0.35 \times 1.6)^{\frac{1}{2}}$$

$$\approx -2(\mathrm{V})$$

由题中条件知

$$V_{FB} = -2\mathrm{V}$$

故

$$V_G = V_s + V_0 + V_{FB} = -(0.35 + 2 + 2) = -4.35(\mathrm{V})$$

当衬底为强反型时有

$$V_s = 2V_B = 0.35 \times 2 = -0.70(\mathrm{V})$$

又因为

$$Q_s \infty V_s^{\frac{1}{2}}$$

所以

$$V_0 = \sqrt{2}V'_0 = 1.414 \times 2 = 2.8(\mathrm{V})$$

$$V_{FB} = -2(\mathrm{V})$$

$$V_G = V_s + V_0 + V_{FB} = -(0.70 + 2.8 + 2) = -5.5(\mathrm{V})$$

(2) ① 当 $V_G = 0, V_B = 1\mathrm{V}$ 时，求室温时反向电流。

因为 $V_G=0$，半导体表面为多子积累层（由于 $SiO_2$ 层中正电荷的影响）；

所以无场感应结，此时反向电流仅为通过冶金结耗尽区的产生电流。反向漂移电流 $I_s$ 是非常小的，可忽略不计。计算如下：

因为
$$I_s = J_{SA} = \frac{qD_p p_{n0}}{L_p} = \sqrt{\frac{k_0 T\mu_p q}{\tau_p}} \cdot \frac{n_i^2}{N_D} \cdot A$$

代入数据

$$I_s = \sqrt{\frac{1.38\times10^{-23}\times300\times400\times1.6\times10^{-19}}{10^{-6}}}\times \frac{(1.5\times10^{10})^2}{10^{16}}\times10^{-3}$$
$$= 1.1\times10^{-14}A = 1.1\times10^{12}(\text{pA})$$

耗尽区产生电流为
$$I_{gm} = qG_{mj}x_d A_{mj} = q\frac{n_i}{2\tau}x_d A_{mj}$$

设一般硅 pn 结势垒 $V_D=0.7$ V，则

$$x_d = \sqrt{\frac{2\varepsilon_{rs}\varepsilon_0(V_D+V_p)}{qN_D}}$$
$$= \sqrt{\frac{2\times11.6\times8.85\times10^{-14}\times(0.7+1)}{1.6\times10^{-19}\times10^{16}}}$$
$$= 4.7\times10^{-5}(\text{cm}) = 0.47(\mu\text{m})$$

则
$$I_{gm} = q\frac{n_i}{2\tau}x_d A_{mj} = 1.6\times10^{-19}\times\frac{1.5\times10^{10}}{2\times10^{-6}}\times4.7\times10^{-5}\times10^{-3} = 5.65\times10^{-11}(\text{A})$$

故
$$I_{gm} = 56.5(\text{pA})$$

② 当 $V_G=-20$V 时，形成强反型层，产生了场感应结；由于强反型后界面态对反向电流无甚影响，因此，此时反向电流由两部分组成：穿过冶金结的反向电流 $I_{gm}$ 穿过场感应结的反向电流 $I_{gF}$。即

$$I_g = I_{gm} + I_{gF}$$

式中
$$I_{gF} = qG_{FJ}x_{dm}A_s = q\frac{n_i}{2\tau}x_{dm}A_s$$

$$V_B = \frac{k_0 T}{q}\ln\frac{N_D}{n_i} = 0.026\ln\frac{10^{16}}{1.5\times10^{10}}$$
$$= 0.35(\text{V})$$

$$x_{dm} = \sqrt{\frac{2\varepsilon_{rs}\varepsilon_0(V_R+2V_B)}{qN_D}}$$
$$= \sqrt{\frac{2\times11.6\times8.85\times10^{-14}\times(1+0.7)}{1.6\times0^{-19}\times10^{16}}}$$

$$= 4.7 \times 10^{-5}(\text{cm})$$

所以
$$I_{gF} = q\frac{n_i}{2\tau}x_{dm}A_s = 1.6 \times 10^{-19} \times \frac{1.5 \times 10^{10}}{2 \times 10^{16}} \times 4.7 \times 10^{-5} \times 10^{-3}$$
$$= 5.65 \times 10^{-11}(\text{A}) = 56.5(\text{pA})$$

故反向电流

$$I_g = I_{gm} + I_{gF} = 113(\text{pA})$$

(3) ① 对 $p^+n$ 结，正向偏置时扩散电流主要由 $p^+n$ 结的空穴流形成。即

$$I_D = I_p = qA_s \cdot \frac{D_p p_{n_0}}{L_p}(e^{\frac{qV_F}{k_0T}} - 1)$$
$$= qA_s \cdot \frac{L_p}{\tau_p}\left(\frac{n_i^2}{N_D}\right)(e^{\frac{qV_F}{k_0T}} - 1)$$

取 Si 的扩散系数：$D_p = 13\text{cm}^2/\text{s}$，则

$$L_p = \sqrt{D_p\tau_p} = \sqrt{13 \times 10^{-6}} = 3.6 \times 10^{-3}(\text{cm})$$

代入数据，得

$$I_D = 10^{-13} \times 1.6 \times 10^{-19} \times \frac{3.6 \times 10^{-3}}{10^{-6}} \times \frac{(1.5 \times 10)^2}{10^{16}} \times (e^{\frac{0.4}{0.026}} - 1)$$
$$= 12.96 \times 10^{-15} \times (e^{154} - 1)$$
$$= 6.22 \times 10^{-8}(\text{A}) = 6.22 \times 10^{-2}(\mu\text{A})$$

正向偏压下，势垒区复合电流为

$$I_{rm} = q \cdot A_{mj}\frac{n_i}{2\tau}x_D e^{\frac{qV_F}{2k_0T}}$$

又
$$x_D = \left[\frac{2\varepsilon_{rs}\varepsilon_0(V_D - V)^{\frac{1}{2}}}{qN_D}\right]^{\frac{1}{2}}$$
$$= \left(\frac{2 \times 11.6 \times 8.85 \times 10^{-14} \times 0.4}{1.6 \times 10^{-19} \times 10^{16}}\right)^{\frac{1}{2}}$$
$$= 2.26 \times 10^{-5}(\text{cm})$$

所以
$$I_{rm} = 1.6 \times 10^{-19} \times 10^{-3} \times \frac{1.5 \times 10^{10}}{2 \times 10^{-6}} \times 2.3 \times 10^{-5} \times e^{\frac{0.4}{2 \times 0.026}}$$
$$= 5.7 \times 10^{-8}(\text{A})$$

② 对场感应结势垒区的复合电流，在加正向电压的情况下，开始发生强反型的表面势为

$$V_s = 2V_B - V_F$$

这时耗尽层最大厚度为

$$x_{dm} = \sqrt{\frac{2\varepsilon_{rs}\varepsilon_0(2V_B - V_F)}{qN_D}}$$

代入数据得

$$x_{dm}=\sqrt{\frac{2\times 11.6\times 8.85\times 10^{-14}\times 2\times 0.35-0.4}{1.6\times 10^{-19}\times 10^{16}}}$$

$$=2\times 10^{-5}(\text{cm})$$

故势垒区的复合电流 $$I_{rF}=\frac{1}{2}qn_i\frac{x_{dm}}{\tau}e^{\frac{qV_F}{k_0T}}$$

代入数据得

$$I_{rF}=\frac{1}{2}\times 1.6\times 10^{-19}\times 1.5\times 10^{10}\times\frac{2\times 10^{-5}}{10^{-6}}$$

$$\times 10^{-3}e^{\frac{0.4}{2\times 0.026}}=5.28\times 10^{-8}(\text{A})$$

界面态对正向复合电流的贡献为

$$I_{rs}=\frac{1}{2}qn_iS_0A_se^{\frac{qV_F}{2k_0T}}$$

$$=\frac{1}{2}\times 1.6\times 10^{-19}\times 1.5\times 10^{10}\times 5\times 10^{-3}\times e^{\frac{0.4}{2\times 0.026}}$$

$$=1.32\times 10^{-8}(\text{A})$$

故(i)当 $V_G=0$,无场感应结。故正向电流

$$I_p=I_D+I_{rm}=6.22\times 10^{-8}+5.7\times 10^{-8}$$

$$=11.92\times 10^{-8}(\text{A})$$

(ii) 当 $V_G=-20\text{V}$,冶金结和场感应结同时对正向电流有贡献。即

$$I_p=I_D+I_{rm}+I_{rF}=11.92\times 10^{-8}+5.28\times 10^{-8}$$

$$=17.2\times 10^{-8}(\text{A})$$

(iii) 正向电流和栅压 $V_G$ 的函数关系,对冶金结耗尽层宽度

$$x_d=\sqrt{\frac{2\varepsilon_{rs}\varepsilon_0(V_D+V_B)}{qN_D}}$$

对场感应结,耗尽层度宽为 $W$。

由 $$V_G-V_{FB}=-\frac{Q_s}{C_i}+V_s$$

$$V_s=-\frac{qN_DW^2}{2\varepsilon_{rs}\varepsilon_0}\qquad Q_s=qN_DW$$

所以 $$V_G-V_{FB}=-\frac{qN_DW}{C_i}-\frac{qN_DW^2}{2\varepsilon_{rs}\varepsilon_0}$$

即 $$\frac{qN_D}{2\varepsilon_{rs}\varepsilon_0}W^2+\frac{qN_D}{C_i}W+(V_G+V_{FB})=0$$

解此方程得

$$W=\frac{-\frac{qN_D}{C_i}\pm\sqrt{\left(\frac{qN_D}{C_i}\right)^2+\frac{\partial qN_D}{\varepsilon_{rs}\varepsilon_0}(V_G-V_{FB})}}{\frac{qN_D}{\varepsilon_{rs}\varepsilon_0}}$$

显然只能取“+”号，故

$$W=\left[\left(\frac{\varepsilon_{rs}\varepsilon_0}{C_i}\right)^2+\frac{2\varepsilon_{rs}\varepsilon_0}{qN_D}(V_G-V_{FB})\right]^{\frac{1}{2}}-\frac{\varepsilon_{rs}\varepsilon_0}{C_i}$$

根据栅控二极管的情况，可分成三个阶段讨论。

(a) $V_G$ 使表面载流子堆积，这时只有冶金结电流。

反向偏置时：

$$I_R=I_{gm}=\frac{1}{2}q\frac{n_i}{\tau}x_dA_{mj}$$

$$=\frac{1}{2}q\frac{n_i}{\tau}\left[\frac{2\varepsilon_{rs}\varepsilon_0(V_D+V_R)}{qN_D}\right]^{\frac{1}{2}}A_{mj}$$

正向偏置时：

$$I_p=(I_D+I_{gm})e^{\frac{qV_F}{2k_0T}}$$

显然，它们与栅压 $V_G$ 无关。

(b) $V_G$ 使表面耗尽情况，这时同时与 $I_{gm}$，$I_{gs}$ 有关。

反向偏置时：

$$I_R=I_{gm}+I_{gF}+I_{gs}$$

$$=\frac{1}{2}q\frac{n_i}{\tau}x_dA_{mj}+\frac{1}{2}q\frac{n_i}{\tau}\left\{\left[\frac{(\varepsilon_{rs}\varepsilon_0)^2}{C_i^2}+\frac{2\varepsilon_{rs}\varepsilon_0}{qN_A}(V_G-V_{FB})\right]^{\frac{1}{2}}-\frac{qN_A}{C_i}\right\}A_s+\frac{1}{2}qn_iS_0A_s$$

正向偏置时：

$$I_p=(I_D+I_R)e^{\frac{qV_F}{2k_0T}}$$

(c) $V_G$ 使表面反型时：

反向偏置：

$$I_R=I_{gm}+I_{gF}=\frac{1}{2}q\frac{n_i}{\tau}x_dA_{mj}+\frac{1}{2}q\frac{n_i}{\tau}\left\{\left[\frac{(\varepsilon_{rs}\varepsilon_0)^2}{C_i^2}+\frac{2\varepsilon_{rs}\varepsilon_0}{qN_D}(V_G-V_{FB})\right]^{\frac{1}{2}}-\frac{qN_A}{C_i}\right\}A_s$$

正向偏置：

$$I_p=(I_D-I_{gM}+I_{gF})e^{\frac{qV_F}{2k_0T}}$$

**【例 8-15】** 表面反型沟道中载流子在垂直表面方向上被限制在势阱中运动使能量量子化。在平行表面方向为自由运动，因而形成准二维子带，求各个子带的状态密度。

**解：** 在二维 $k$ 空间中，在 $\left(\frac{2\pi}{L}\right)^2$ 范围内存在一个量子态（$L$ 为方形样品的边长），如果考虑到电子的自旋，$k$ 范围内的状态数为

$$2\times\pi k^2\times\left(\frac{L}{2\pi}\right)^2=\left(\frac{L^2k^2}{2\pi}\right)$$

如果在平行表面方向上电子的有效质量为 $m_{\parallel}$，则

$$E=\frac{\hbar^2k^2}{2m_{\parallel}}$$

能量在 $E$ 和 $(E+\mathrm{d}E)$ 间的状态数为 $N(E)\mathrm{d}E$，所以状态密度

$$N(E)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}E}\left(\frac{L^2k^2}{2\pi}\right)=\frac{m_{\parallel}L^2}{\pi\hbar^2}$$

如果取 $L=1$，则状态密度

$$N(E)=m_{\parallel}/\pi\hbar^2$$

为一常数。

**【例 8-16】** 有一薄层晶体样品，其长、宽、厚分别为 $L_x$、$L_y$、$L_z$，且 $L_z\ll L_x,L_y$。样品中的电子可以被认为在一势阱中运动，其能量谱值为

$$E=\frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2+k_y^2+k_z^2)$$

$$=\frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2+k_y^2)+E_z(n) \tag{1}$$

其中

$$k_x=l\frac{2\pi}{L_x},k_y=m\frac{2\pi}{L_y}\qquad(l,m=0,\pm1,\cdots)$$

$$k_z=n\frac{\pi}{L_z}\qquad(n=1,2,\cdots) \tag{2}$$

$$E_z=\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n\pi}{L_z}\right)^2 \tag{3}$$

试分析一下能量谱值分布的特点，求出电子的状态密度 $g(E)$，并用图形表示。

**解**：由于 $L_z$ 很小，所以 $k_z$ 的取值是量子化的，$\boldsymbol{k}$ 的代表点在 $\boldsymbol{k}$ 空间分布在一系列与 $k_z$ 轴垂直的平面上。由于 $L_x$ 和 $L_y$ 很大，在每个平面上这些代表点的分布是准连续的，它们相应的能量构成二维能带。

我们可先求出二维能带的状态密度，然后再对一系列带的状态密度求和。

(1) 二维情况

根据式(2)给出的 $k_x$ 和 $k_y$ 值，在 $k_x-k_y$ 平面内一个 $k$ 点占的面积是

$$\frac{2\pi}{L_x}\ \frac{2\pi}{L_y}=\frac{4\pi^2}{L_xL_y}$$

考虑到电子自旋的两种取向，在二维情况下，$\boldsymbol{k}$ 空间单位面积内的状态数是

$$2\times\frac{L_xL_y}{4\pi^2}=\frac{L_xL_y}{2\pi^2}$$

而 $k\sim(k+\mathrm{d}k)$ 范围内的状态数则为

$$2\pi k\mathrm{d}k\ \frac{L_xL_y}{2\pi^2}=\frac{L_xL_y}{\pi}k\mathrm{d}k \tag{4}$$

把式(1)写成

$$E = E_z(n) + \frac{\hbar^2}{2m}k^2$$

则

$$\mathrm{d}E = \frac{\hbar^2}{m}k\,\mathrm{d}k \tag{5}$$

由式(4)和式(5)得 $E \sim (E + \mathrm{d}E)$ 范围内的状态数

$$g'(E)\mathrm{d}E = \frac{L_x L_y m}{\pi\hbar^2}\mathrm{d}E$$

或

$$g'(E) = \frac{L_x L_y m}{\pi\hbar^2} \tag{6}$$

上式表明,二维能带的状态密度是与能量无关的。

(2) 三维情况

由式(1)可以看到,等能面是球形。为了求出状态密度 $g(E)$,只要求出 $E$ 和$(E+\mathrm{d}E)$ 两个等能面之间的状态数,再除以能量间隔 $\mathrm{d}E$ 就可以了,取

$$E_z(n) < E < E_z(n+1)$$

在图 8-20 中分别以实线和虚线画出能量为 $E$ 和$(E+\mathrm{d}E)$ 的两个等能面及能量为 $E_z(n)$ 和 $E_z(n+1)$ 的两个等能面在 $k_x - k_z$ 平面的截迹($k_z > 0$)。

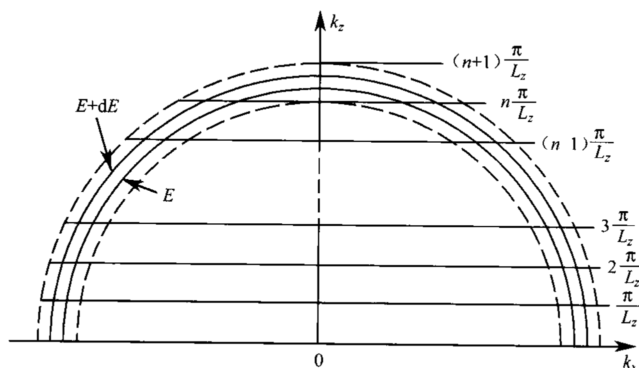



图 8 20　等能面在 $k_x - k_z$ 平面的分布曲线

如图 8-20 所示,当 $E$ 在$E_z(n) < E < E_z(n+1)$ 范围内时,共有 $n$ 个与量子化的$k_z$ 值相对应的、垂直于 $k_z$ 轴的平面,与等能面 $E$ 和$(E+\mathrm{d}E)$ 相交,它们被这两个等能面构成的球壳截出 $n$ 个圆环。计算能量在 $E \sim (E+\mathrm{d}E)$ 内的状态数时,应把这 $n$ 个圆环中的代表点都包括进去。由于二维能带的状态密度是与能量无关的常数,所以,当考虑到电子能量在第三个方向上量子化的情况下,状态密度 $g(E)$ 由下式表示

$$g(E)\mathrm{d}E = n \cdot g'(E)\mathrm{d}E$$

$$= n\frac{L_x L_y}{\pi\hbar^2}\mathrm{d}E$$

由式(3)可得

$$n = \frac{L_z}{\pi}\frac{[2mE_z(n)]^{\frac{1}{2}}}{\hbar}$$

故

$$g(E) = \frac{\sqrt{2}L_x L_y L_z m^{3/2}}{\pi\hbar^3}[E_z(n)]^{1/2}$$

$$(n = 1,2,3,\cdots) \tag{7}$$

式(7)给出的电子的状态密度如图 8-21 所示。由于每个二维能带的状态密度与能量无关,因此对一系列子带累计的状态密度有类似阶跃的特性。

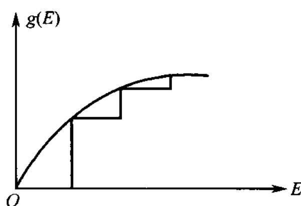



图 8-21　电子状态密度随能量 $E$ 变化关系

# 第9章 异 质 结

**主题词**

异质结，异质结能带图，导带阶和价带阶，晶格失配，悬挂键密度和界面态，异质结的电流电压特性，异质结的高注入比和超注入现象，异质结的调制掺杂，高迁移率特性，二维电子气，应变异质结，半导体超晶格。

## 9.1 理论概要与重点分析

（1）由两种不同的半导体材料形成的结，称为异质结。异质结是同质结的引申和发展，而同质结是异质结的特殊情况。异质结分为同型异质结（如 n-nGe-GaAs，p-pGe-Si，等）和反型异质结（如 p-nGe-GaAs，p-nGe-Si 等）。另外，根据结处两种材料原子过渡的陡、缓情况，可分为突变和缓变异质结。

通常形成异质结的两种材料沿界面有相近的结构，因而界面仍保持晶格连续。

（2）研究异质结的特性时，异质结的能带图起着重要作用。在不考虑界面态的情况下，任何异质结能带图都取决于两侧半导体材料的电子亲和能、禁带宽度、功函数（随掺杂类型及浓度而异）三个因素。然而平衡异质结内具有统一费米能级仍然是画能带图的重要依据。

由于禁带宽度和电子亲和能不同，两种半导体的 $E_c$、$E_v$，在交界面处出现不连续而发生突变，其突变量：

导带阶
$$\Delta E_c = \chi_1 - \chi_2 \tag{9.1}$$

价带阶
$$\Delta E_v = (E_{g2} - E_{g1}) - (\chi_1 - \chi_2) \tag{9.2}$$

而且
$$\Delta E_c + \Delta E_v = E_{g2} - E_{g1} \tag{9.3}$$

它们的高低改变了导带电子和价带空穴各自进入对方区域的势垒高度，相对于同质结使电子和空穴势垒失去对称，成为研究异质结电流输运特性的物理基础。

（3）异质结两侧半导体材料的晶格常数不同，引起晶格失配。晶格失配定义为

$$\frac{\text{晶格常数差}}{\text{平均晶格常数}} = \frac{2(a_2 - a_1)}{a_2 + a_1} \tag{9.4}$$

由于晶格失配，必然在界面处存在悬挂键而引入界面态，晶格失配越严重，悬挂键密度越高，界面态密度越大。

不同晶面相接触形成异质结其悬挂键密度是不同的，经推算，几个主要面形成异质结后的悬挂键密度 $\Delta N_s$ 分别为

$$
\left.\begin{aligned}
&(111)\text{面} \qquad && \frac{2}{\sqrt{3}}\left(\frac{a_2^2-a_1^2}{a_2^2a_1^2}\right)\\
&(110)\text{面} \qquad && \frac{4}{\sqrt{2}}\left(\frac{a_2^2-a_1^2}{a_2^2a_1^2}\right)\\
&(100)\text{面} \qquad && 4\left(\frac{a_2^2-a_1^2}{a_2^2a_1^2}\right)
\end{aligned}\right\} \tag{9.5}
$$

如果界面态的密度很大($10^{13}/cm^2$ 以上)，表面处的费米能级在表面价带以上禁带宽度的$\frac{1}{3}$处。对 n 型半导体，界面态起受主作用，界面态接受体内电子，界面带负电，半导体表面带正电，使能带上弯。对 p 型半导体，界面态起施主作用，界面态向体内施放电子，界面带正电，半导体表面带负电，使能带下弯。总之高界面态的存在，使异质结的能带图与理想情况相比有较大的变化。

(4) 因为异质结在结处能带不连续，存在势垒尖峰和势阱，而且还有不同程度的界面态和缺陷，使异质结的电流传输问题比同质结要复杂得多。不存在一种在多数情况下起主导作用的电流传输机制，根据结的实际情况发展了多种电流传输模型。这些模型是：扩散模型、发射模型、发射一复合模型、隧道 -复合模型等。分别或联合使用这些模型计算的结果，可使不同异质结的伏安特性有较好的解释。

(5) 异质结的调制掺杂和量子阱结构。如果在异质结宽禁带一边重掺杂，窄禁带一边不掺杂，就构成调制掺杂结构。设宽禁带重掺杂一边为 n 型，其费米能级远高于窄禁带，因而电子从重掺杂一边注入到不掺杂的一边，使电子的输运在不掺杂一边进行。这样使提供载流子的材料与输运载流子的材料在空间上分开，大大减少了载流子输运时受电离杂质的散射作用，使迁移率大为提高，这就是迁移率的增强效应。用此原理可制成异质结高迁移率晶格管。

实际上在调制掺杂结构中，宽禁带重掺杂一边的载流子注入到不掺杂一边的过程中，两边的费米能级逐渐趋于相等，最后达到平衡，在结处形成空间电荷区，其电场使能带发生弯曲，在窄禁带半导体近结处形成电子势阱。窄禁带半导体中获得的高密度电子仅存在于很薄的近似三角形的势阱中。在平行于结面方向，是一种准二维运动，称它为二维电子气。其电子能量

$$E = E_z + E_{xy} = E_i + \frac{\hbar^2}{2m_n^*}(k_x^2 + k_y^2) \tag{9.6}$$

$E_{xy}$ 为平行于结面二维自由运动电子的能量，$E_i$ 为垂直于界面方向运动电子的能量本征值，它为一些分立能级。对应于每个能级 $E_i$，$E_{xy}$ 形成一个子能带，对 $E_i$ 能级，其状态密度为

$$D_i = \frac{m_n^*}{2\pi\hbar^2} \tag{9.7}$$

它与 $E$ 无关，对所有子能带都相同。因此，二维电子气的总状态密度

$$D(E) = \sum_i D_i(E) \tag{9.8}$$

随着外延极薄层材料技术的发展，可在宽禁带半导体材料上异质外延薄层窄禁带半导体材料，然后再异质外延宽禁带半导体材料，形成双异质结单量子阱结构。由于导带有导带价 $\Delta E_c$，价带有价带阶 $\Delta E_v$ 存在，形成近似方形的导带、价带量子阱，在导带势阱中形成平行于结面的二维电子气；在价带中形成平行结面的二维空穴气。它们在势阱中的能量及状态密度与调制掺杂异质结界面量子阱中的情况类似。但由于价带顶有轻、重空穴带之分，且 $E(k)$ 关系为非抛物线型，所以显得更为复杂。

(6) 匹配异质结材料的发展。组成异质结的两种半导体材料的晶格失配较大时，界面处的位错、缺陷太多，不能形成良好的异质结，所以做异质结两种材料的选取非常苛刻。元素和二元化合物半导体中找出失配小于 0.1%的极少。利用三元、四元合金材料来调控其晶格常数，可使两种材料的晶格常数非常接近，可获得更多的匹配异质结。

为开辟更大范围的匹配异质结，在一种材料衬底上，外延另一种不太匹配的材料，只要外延层厚度不超过某一临界值，生长的外延层可发生弹性形变，平行于结面方向的晶格产生张应变或压缩应变，使其晶格常数与衬底相匹配，这种异质结称为应变异质结。异质结无界面失配应变层的生长模式称为赝晶生长。

由于赝晶层的应变使材料的能带结构发生变化，引起电子和空穴在能带中分布发生变化从而使迁移率发生变化。例如在 $n^+$-$Si_{0.8}Ge_{0.2}$-Si 结构的 Si 应变层中，室温下测得迁移率为 2830cm$^2$/(V·s)比无应变 Si 的电子迁移率增大近一倍。

(7) 半导体超晶格。用交替生长两种半导体材料薄层，组成的一维周期结构，其薄层厚度的周期小于电子的平均自由程(可以是晶格常数的 2～20 倍)，且整个结构保持晶格的连续性的人工材料，称为半导体超晶格。

超晶格分为成分超晶格和掺杂超晶格两类。前者为不同薄层材料的交替生长，后者是相同材料薄层周期性地改变其掺杂类型。

对成分超晶格，一种薄层的厚度为 $b$，另一种为 $c$，则其周期 $l = b + c$。由于两种材料的禁带宽度不同，在超晶格方向形成以 $l$ 为周期的势阱(或势垒)。在超晶格平面内电子为准二维运动，在超晶格方向上，经理论推导证明，其 $E_z \sim k_z$ 关系在

$$k_z = \pm \frac{n\pi}{l} \qquad n = \pm 1, \pm 2, \cdots \tag{9.9}$$

处不连续，产生能量的阶跃。因超晶格周期 $l$ 比晶格常数 $a$ 大得多，所以把正常晶体的 $z$ 方向由 $\left(\pm \frac{n\pi}{a}\right)$ 所决定的布里渊区被分割为由 $\left(\pm \frac{n\pi}{l}\right)$ 所决定的超晶格材料的许多微布里渊区。在微布里渊区中，$E_z$ 随 $k_z$ 连续变化，而在 $\left(\pm \frac{n\pi}{l}\right)$ 处发生跃变，即出现许多子能带。

如果 $z$ 方向加电场，子能带中的电子可以从能带底运动到能带顶，有效质量由正变负，其导电特性出现负阻现象。同样利用调制掺杂的办法，电子从高掺杂宽禁带半导体注入不掺杂窄禁带半导体中，达到提高电子迁移率的目的。

## 9.2 概念思考与练习题

【9-1】 何谓异质结？异质结如何分类？试以 Ge 和 GaAs 为例，说明异质结的表示法。

【9-2】 何谓突变异质结和缓变异质结？它们与同质的突变 p-n 结和缓变 p-n 结有何区别？

【9-3】 要准确画出一个理想异质结的能带图，必须要知道两种半导体的哪几个参数？由于禁带宽度不同确定它们各自能级的相对位置，以什么作标准？

【9-4】 图 9-1 是突变 n-p 异质结的平衡能带图，(a)为形成异质结前，(b)为形成异质结后的能带图。讨论：(1)内建电场的建立和能带弯曲的大小与原来费米能级的关系；(2)异质结能带在交界面的特点。

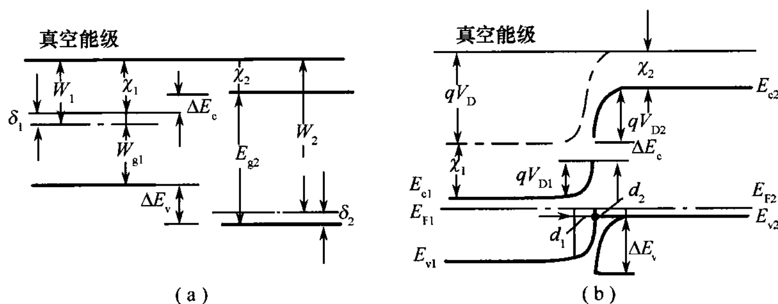



图 9-1 题 9-4 用图

【9-5】 以晶格常数为 $a$ 的金刚石结构材料形成的异质结为例，计算(111)，(110)(100)的悬挂键密度，并比较其大小。

【9-6】 如何区分界面的原子面密度、键面密度和悬挂键面密度，是否原子面密度大的悬挂键面密度一定大？

【9-7】 图 9-2 的两个异质结能带图都是 n-n 型材料构成的。它们是否正确？如何解释。

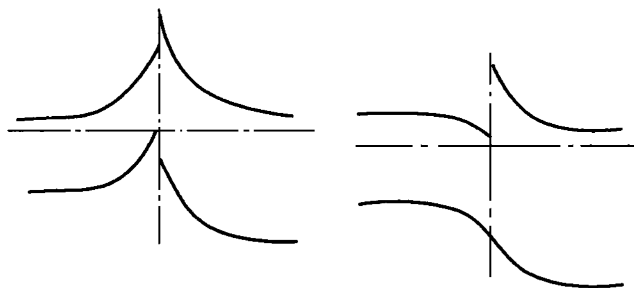


图 9-2 题 9-7 用图

【9-8】 比较异质结与同质结的不同。根据异质结的独特性质，说明异质结的应用。

【9-9】 为什么异质结的电流输运机构比同质结复杂得多？

【9-10】 形成异质结时能带会出现“尖峰”，试说明在什么条件下“尖峰”出现在导带？在什么条件下出现在价带？说明异质结能带图中出现能带尖峰时对伏一安特性有无影响？

【9-11】 现有两种材料，一边为 p 型，一边为 n 型，且 $E_{g1}<E_{g2}\chi_1<\chi_2$，$W_1<W_2$。试定性画出(1)$\chi_2>\chi_1+E_{g1}$和(2)$\chi_2<\chi_1+E_{g1}$两种情况下的异质结能带图。

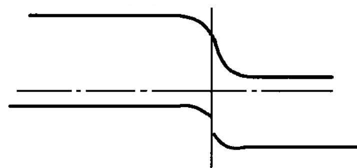


图 9-3 题 9-13 用图

【9-12】 画出下列能带图：(1)p-Ge 与 n-GaAs 构成的异质结(2)p-Ge 与 p-GaAs 构成的异质结。

【9-13】 图 9-3 为没有考虑界面态时的 p-n 异质结能带图，如果在界面上有(1)施主型界面态，(2)受主型界面态，那么能带图如何变化？

【9-14】 什么叫做二维电子气？在异质结的哪些结构和区域中运动的电子可以称为二维电子气，其能态状况如何？

【9-15】 双异质结的单量子阱结构中，价带量子阱的空穴能态为什么要比导带电子能态要复杂得多？

【9-16】 在调制掺杂异质结结构中为什么出现高迁移率特性？如何利用这种特性制成高频微波器件？

【9-17】 什么叫应变异质结？如何才能得到无界面失配的应变层？它对获得好的异质结性能和应用产生什么重要影响？

【9-18】 应变层晶格的应变对能带结构和材料特性有何影响？

【9-19】 什么叫超晶格？它分为几类。用简图说明如何形成？

【9-20】 为什么超晶格会在正常晶格的布里渊区内形成许多微布里渊区？如果在垂直超晶格材料方向施加电场，会出现什么现象，为什么？

## 9.3 典型例题解析

【例 9-1】 晶格常数分别为 $a_1$、$a_2$ 的两种材料，皆为金刚石结构，当分别在(100)、(110)及(111)面构成异质结时，求悬挂键密度。

**解：** 对(100)面的基矢 $\boldsymbol{l}_1,\boldsymbol{l}_2$，在$(0\bar{1}\bar{1})$、$(0\bar{1}1)$方向上，长度为 $a/\sqrt{2}$，其晶面网孔的面积为 $a^2/2$，网孔 4 个角上的原子各有两个键，每个原子属于 4 个网孔共有，所以每个网孔中有 2 个键。于是在(100)晶面上形成的悬挂键密度

$$\Delta N_s(100)=4\left(\frac{1}{a_2^2}-\frac{1}{a_1^2}\right)$$

对(110)晶面上的原子有 4 个角顶上等效为 1 个原子，面对角线上的两个原子等效为 1 个原子，体内对角线上有 2 个原子，总计 4 个原子，每个原子向(110)面伸出一个键，故(110)晶面上形成的悬挂键密度

$$\Delta N_s(110)=\frac{4}{\sqrt{2}}\left(\frac{1}{a_2^2}-\frac{1}{a_1^2}\right)$$

对(111)晶面上的原子有3个角顶上的等效为$(3\times\frac{1}{6})=\frac{1}{2}$个原子，面对角线上的3个原子等效为$(3\times\frac{1}{2})=\frac{3}{2}$个原子，总计2个原子，且每个原子向(111)面伸出一个键，故(111)晶面上形成的悬挂键密度

$$\Delta N_s(111)=\frac{4}{\sqrt{3}}\left(\frac{1}{a_2^2}-\frac{1}{a_1^2}\right)$$

**【例9-2】** 图9-4(a)、(b)、(c)分别表示形成异质结前n型和p型材料，n型和n型材料及p型和p型三对材料的能带图。试画出形成异质结后对应异质结的能带结构。

**解：**对于n型和p型这一对材料，当它们接触形成异质结时电子将从费米能级高的n型一侧流向p型一侧，平衡时费米能级处处相等。在n型、p型材料表面形成耗尽层；建立起由左指向右的内建场。于是在n型侧由体内向表面能带向上弯曲，p型材料侧由表面向体内电子能量升高，形成如图9-4(d)所示的能带结构。

对n型和n型这对同型材料，形成异质结后左侧($E_g$小)表面层形成电子积累，而右侧形成耗尽层，构成如图9-4(e)所示的能带。

对p型和p型这对材料与n型和n型做类似的讨论可得图9-4(f)。

对每种情况在界面处均满足

$$\Delta E_c=\chi_1-\chi_2,\Delta E_v=(E_{g2}-E_{g1})-(\chi_1-\chi_2),\Delta E_c+\Delta E_v=E_{g2}-E_{g1}$$

**【例9-3】** 求pn异质结在饱和电离情况下内建电场及内建电势的空间分布。

**解：**设pn异质结如图9-5(a)，p侧的电势为$V_p$，n侧的电势为$V_n$，空间电荷区的边界为$x_p$及$x_n$，则电势分布满足

$$\frac{d^2V}{dx^2}=0,\text{当}-\infty<x<-x_p,x_n<x<\infty \tag{1}$$

$$\frac{d^2V_p}{dx^2}=\frac{q}{\varepsilon_0\varepsilon_{r1}}N_{A1},\text{当}-x_p\leqslant x<0 \tag{2}$$

$$\frac{d^2V_n}{dx^2}=-\frac{q}{\varepsilon_0\varepsilon_{r2}}N_{D2},\text{当}0<x\leqslant x_n \tag{3}$$

由于电场强度

$$\mathscr{E}=-\frac{dV}{dx}$$

式(2)和式(3)可写成

$$\frac{d\mathscr{E}}{dx}=-\frac{q}{\varepsilon_0\varepsilon_{r1}}N_{A1},-x_p<x<0 \tag{4}$$

$$\frac{d\mathscr{E}}{dx}=\frac{q}{\varepsilon_0\varepsilon_{r2}}N_{D2},0<x<x_n \tag{5}$$

将式(4)和式(5)积分，得

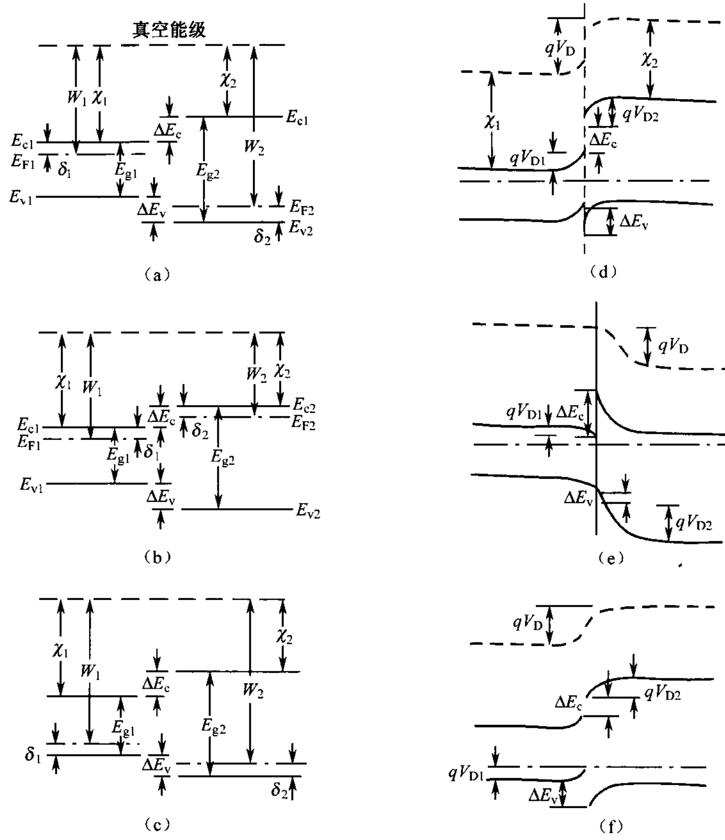



图 9-4　n-p、n-n、p-p 异质结能带图

$$\mathscr{E} = -\frac{\mathrm{d}V_p}{\mathrm{d}x} = -\frac{q}{\varepsilon_0\varepsilon_{r1}} N_{A1} x + A_1 \tag{6}$$

$$\mathscr{E} = -\frac{\mathrm{d}V_n}{\mathrm{d}x} = \frac{q}{\varepsilon_0\varepsilon_{r2}} N_{D2} x + A_2 \tag{7}$$

在空间电荷区边界上电场强度为零，故

$$A_1 = -\frac{q}{\varepsilon_0\varepsilon_{r1}} N_{A1} x_p$$

$$A_2 = -\frac{q}{\varepsilon_0\varepsilon_{r2}} N_{D2} x_n$$

将 $A_1$ 和 $A_2$ 代入式(6)和式(7)得

$$\mathscr{E} = -\frac{\mathrm{d}V_p}{\mathrm{d}x} = -\frac{q}{\varepsilon_0\varepsilon_{r1}} N_{A1} (x + x_p) \tag{8}$$

$$\mathscr{E} = -\frac{\mathrm{d}V_n}{\mathrm{d}x} = -\frac{q}{\varepsilon_0\varepsilon_{r2}} N_{D2} (x_n - x) \tag{9}$$

将式(8)和式(9)积分，得

$$V_p = \frac{q}{\varepsilon_0\varepsilon_{r1}} N_{A1}\left(\frac{x^2}{2} + x_p x\right) + B_1 \tag{10}$$

$$V_n = \frac{q}{\varepsilon_0\varepsilon_{r2}} N_{D2}\left(x_n x - \frac{1}{2}x^2\right) + B_2 \tag{11}$$

令 $x = -x_p$ 处的 $V = 0$，得

$$B_1 = \left(\frac{q}{\varepsilon_0\varepsilon_{r1}}\right) N_{A1} \frac{x_p^2}{2}$$

于是

$$V_p = \frac{q}{2\varepsilon_0\varepsilon_{r1}} N_{A1}(x_p + x)^2, -x_p < x < 0 \tag{12}$$

取 $x = 0$ 得 p 侧内建势

$$V_{Dp} = \frac{q}{2\varepsilon_0\varepsilon_{r1}} N_{A1} x_p^2 \tag{13}$$

在 n 侧 $x = x_n$ 处 $V_n$ 等于内建势，因而

$$B_2 = V_D - \frac{q}{2\varepsilon_0\varepsilon_{r2}} N_{D2} x_n^2$$

于是

$$V_n = V_D - \frac{q}{2\varepsilon_0\varepsilon_{r2}} N_{D2}(x_n - x)^2 \tag{14}$$

在 $x = 0$ 处 $V_n = V_{Dp}$，即

$$V_n = V_{Dp} = V_D - \frac{q}{2\varepsilon_0\varepsilon_{r2}} N_{D2} x_n^2 \tag{15}$$

由于

$$V_D = V_{Dn} + V_{Dp} \tag{16}$$

因此

$$V_{Dn} = \frac{q}{2\varepsilon_0\varepsilon_{r2}} N_{D2} x_n^2 \tag{17}$$

所以式(14)可写成

$$V_n = V_{Dp} + \frac{q}{2\varepsilon_0\varepsilon_{r2}} N_{D2}[x_n^2 - (x_n - x)^2] \qquad 0 < x < x_n \tag{18}$$

式(8)、式(9)、式(12)、式(18)分别表示出内建场及内建势的表达式，对两种给定的材料，它们随 $x$ 的变化关系如图 9-5(b)、(c)所示。对 p-n 异质结空间电荷区的分析与同质结基本相同，区别只在于两侧的 $\varepsilon_r$ 不同和在能带图中导带和价带会阶跃。

**【例 9-4】** 试以 GaAs-$Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ p-n 异质结为例说明绘制能带图的主要过程与公式，画能带图。

**解：** 设在 n 型材料中饱和电离时电子浓度 $n = N_{D2}$，而在 p 型材料中空穴浓度为 $p = N_{A1}$。设在非简并状态，则 n 侧、p 侧费米能级分别为

$$E_{F2} = E_c + k_0 T\ln(n/N_c)$$

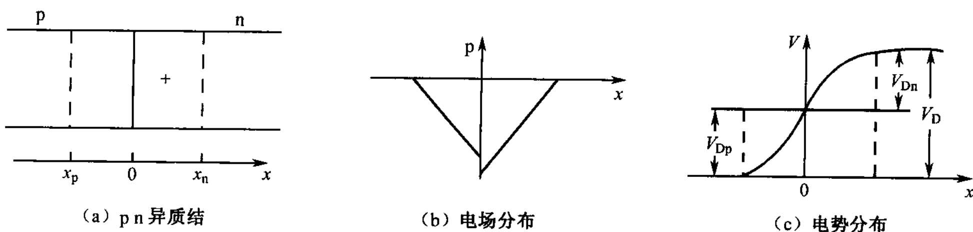



图 9-5　例 9-3 图

$$E_{F1} = E_v - k_0 T\ln(n/N_v)$$

式中 $N_c$ 及 $N_v$ 分别为导带电子状态密度及价带空穴状态密度。由费米能级差决定内建势为

$$V_D = \frac{E_{F2} - E_{F1}}{q}$$

利用 $\frac{V_{D1}}{V_{D2}} = \frac{\varepsilon_2 N_{D2}}{\varepsilon_1 N_{A1}}$ 及上式联立即可求得 p 侧及 n 侧的内建势为

$$V_{Dp} = V_D/[1 + \varepsilon_1 N_{A1}/\varepsilon_2 N_{D2}]$$

$$V_{Dn} = V_D - V_{Dp}$$

然后，利用平衡时势垒区左右两侧空间电荷区宽度的公式(9-37)、式(9-38)(教材《半导体物理学》(第七版)P. 280)得空间电荷区宽度为

$$x_n = \left[\frac{2\varepsilon_1\varepsilon_2 N_{A1} V_D}{qN_{D2}(\varepsilon_1 N_{A1} + \varepsilon_2 N_{D2})}\right]^{1/2}$$

$$x_p = \left[\frac{2\varepsilon_1\varepsilon_2 N_{D2} V_D}{qN_{A1}(\varepsilon_1 N_{A1} + \varepsilon_2 N_{D2})}\right]^{1/2}$$

为了求得 $E_c$、$E_v$ 随 $x$ 的变化，方便的办法是令 $x < x_n$ 时 $E_{v2} = 0$，则

$$E_{v1} = qV_D + \Delta E_v, -\infty < x < -x_p \tag{1}$$

$$E_{v1} = qV_D + \Delta E_v - \frac{q^2 N_{A1}}{2\varepsilon_0\varepsilon_{r1}}(x_p + x)^2 - x_p < x < 0 \tag{2}$$

在 $x = 0$ 处 $E_v$ 有一向下的阶跃 $\Delta E_v$，因而在 n 侧

$$E_{v2} = qV_{Dn} - \frac{q^2 N_{D2}}{2\varepsilon_0\varepsilon_{r2}}[x_n^2 - (x_n - x)^2] \qquad 0 < x < x_n \tag{3}$$

$$E_{v2} = 0 \tag{4}$$

由于 $\Delta E_v + \Delta E_c = E_{g2} - E_{g1}$，所以 p 侧的导带

$$E_{c1} = E_{v1} + E_{g1}, \qquad -\infty < x < -x_p$$

$$E_{c1} = qV_D + E_{g2} - \Delta E_c - \frac{q^2 N_{A1}}{2\varepsilon_0\varepsilon_{r1}}(x_p + x)^2, \qquad -x_p < x < 0$$

n 侧的导带

$$E_{c2}=qV_{Dn}+E_{v1}-\frac{q^2N_{D2}}{2\varepsilon_0\varepsilon_{r2}}[x_n^2-(x_n-x)^2],\qquad 0<x\leqslant x_n$$

$$E_{c2}=E_{g2},\qquad x_n<x<\infty$$

式(1)～式(4)决定价带 $E_v$ 随 $x$ 的变化，显然 $E_{c1}=E_{v1}+E_{g1}$ 及 $E_{c2}=E_{v2}+E_{g2}$。

根据 R. Dingle 对 GaAs-$Al_xGa_{1-x}As$ 异质结的分析，当 $x=0.3$ 时有

$$\Delta E_v=(0.85\pm0.03)(E_{g2}-E_{g1})$$

$$\Delta E_c=(0.15\pm0.03)(E_{g2}-E_{g1})$$

根据以上诸结果，假设 p 型 GaAs 中空穴浓度为 $p=1.1\times10^{18}\ cm^{-3}$，n 型 $Ga_xAl_{1-x}As$(取 $x$=0.3)中电子浓度 $n=3\times10^{17}\ cm^{-3}$，并在室温时

$$N_{c2}=1.76\times10^{18}(1/cm^3)$$

$$N_{v1}=7\times10^{18}(1/cm^3)$$

则可求得

$$E_{F1}-E_{v1}=0.05(V)$$

$$E_{c2}-E_{F2}=0.046(V)$$

由于室温 GaAs 的 $E_{g1}$=1.42eV，$Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ 的 $E_{g2}$=1.82eV，得

$$\Delta E_v=0.34(eV)$$

$$\Delta E_c=0.06(eV)$$

进一步利用相关公式得

$$V_D=1.66(V)$$

$$V_{Dp}=0.31(V)$$

$$V_{Dn}=1.35(V)$$

$$x_p=0.02(\mu m)$$

$$x_n=0.074(\mu m)$$

根据上述 7 式可得如图 9-6 所示 GaAs-$Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ 在室温(297K)的平衡能带图。

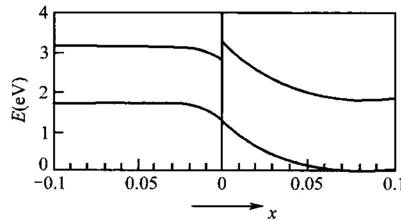



图 9-6　GaAs-$Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ 在室温(297K)的平衡能带图

【例 9-5】 试估计 GaAs 和 $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ 在 300K 的注入比。

**解**：根据 $Al_xGa_{1-x}As$ 的禁带宽度与组分 $x$ 的关系

$$E_g^{Al_xGa_{1-x}As} = 1.424 + 1.266x + 0.266x^2 (eV)$$

得到当 $x = 0.3$ 时室温(297K)下

$$E_g^{Al_{0.3}Ga_{0.7}As} = 1.82(eV)$$

以及 GaAs 在室温的

$$E_g^{GaAs} = 1.424(eV)$$

可得

$$\Delta E_g = E_g^{Al_{0.3}Ga_{0.7}As} - E_g^{GaAs} = 0.396(eV)$$

根据教材式(9-73)，注入比主要是指数项，而且可以将指数项前的因子近似的取做1，于是得注入比

$$\frac{j_{n1}}{j_{p2}} = \exp\left(\frac{E_{g2} - E_{g1}}{k_0 T}\right)$$

$$= \exp\left(\frac{0.395}{0.026}\right) = 5.5 \times 10^6$$

【例 9-6】 试述异质结与同质结不同的地方，并说明异质结的用途。

**解**：异质结除了整流作用、光生伏特效应等和同质结相同之外，还具有一些独特的性质：

(1) 异质结能带上形成的"突变"可能提高少子的注入效率，起电子和空穴有效发射极作用；

(2) 能带中形成的台阶，起限制载流子的作用；

(3) 界面中形成的局部能级，不但是载流子的复合中心和陷阱中心，还起帮助高场强中产生的隧道电流的中继作用；

(4) 局部能级也能起光或电激发载流子的能级作用；

(5) n-n 或 p-p 的同型异质结都是同一种导电类型的半导体，但是适当选择两种材料的禁带宽度和电阻率可能形成与一般 pn 结同样极性的结电势。这种结可以对原子起整流作用。

利用上述异质结特点，目前正在研制各种异质结器件，例如，异质结太阳能电池、异质结发光管、单异质结与双异质结激光器、大光学腔激光器等。图 9-7 表示异质结太阳能电池和双异质激光器能带图。

【例 9-7】 在晶面为(001)的 GaAs 衬底上，重复地交替生长一个原子层的 GaP 和一个原子层的 GaAs。忽略这两种材料晶格常数差异，并假定两种材料的界面处没有缺陷，就可以得到具有统一晶格常数 $a$ 的理想超晶格结构，$(GaAs)_1-(GaP)_1$，如图 9-8 所示。

(1) 指出这种超晶格结构的布拉伐格子是什么形式，并说明理由；

(2) 画出原胞，并利用图中给出的坐标系写出基矢的表示式(要求用晶格常数 $a$ 表示出来)；

(3) 求出倒格子基矢，并指出倒格子是什么形式？

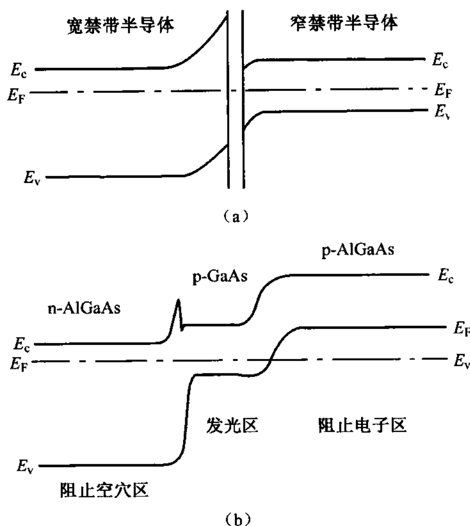



图 9-7 异质结太阳能电池和双异质激光器能带图

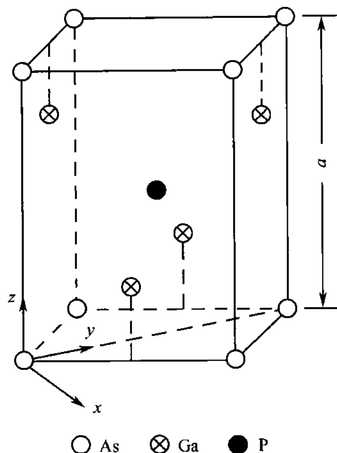



图 9-8 $(GaAs)_1$–$(GaP)_1$ 理想超晶格结构

(4) 画出第一布里渊区。

提示:GaAs 和 GaP 都是闪锌矿结构。根据这两种结构的两个相邻(001)面原子排列情况,可以画出$(GaAs)_1-(GaP)_1$ 超晶格结构的原子排列在一个(001)面上的投影,如图 9-9所示。

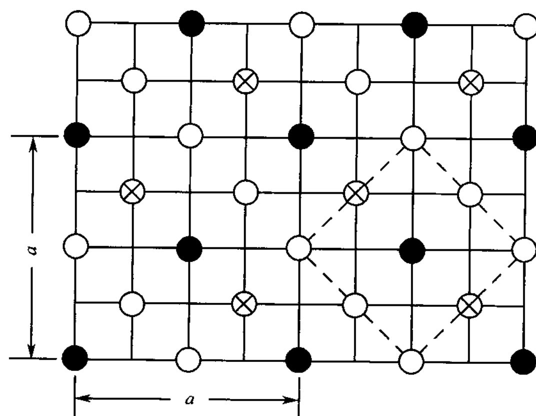
**解:**

(1) 由图 9-8 给出的正方柱体是这种超晶格结构的一个重复排列区域。在顶角上的八个 As 原子周围情况相同。我们把在相对两个侧面上的两个 Ga 原子称为一组。容易看出,同一组内的两个 Ga 原子周围情况完全相同,而不同组的 Ga 原子周围情况却不一样,例如,P 原子在一组的上方 $a/4$ 处,而在另一组的下方 $a/4$ 处。因此,为了反映这种结构的周期性,基元应包括一个 As 原子、一个 P 原子和两个 Ga 原子。我们把基元代表点选在 As 原子上。由图 9-10 可见,布拉伐格子是简单正方格子,或者说,这种超晶格结构是复式格子,由四套简单正方格子套在一起而成的。

(2) 根据(1)中的分析,画出原胞,如图 9-10 所示。它是一个高为 $a$、底面的边长为 $a/\sqrt{2}$ 的正方柱体(参考图 9-9)。用图中给出的坐标系,可以写出基矢的表示式,即

$$\begin{cases} \boldsymbol{a}_1 = \dfrac{a}{\sqrt{2}}\left(\cos\dfrac{\pi}{4}\boldsymbol{i} + \cos\dfrac{\pi}{4}\boldsymbol{j}\right) = \dfrac{a}{2}(\boldsymbol{i}+\boldsymbol{j}) \\ \boldsymbol{a}_2 = \dfrac{a}{2}(-\boldsymbol{i}+\boldsymbol{j}) \\ \boldsymbol{a}_3 = a\boldsymbol{k} \end{cases} \tag{1}$$

(3) 由图 9-10 可求出原胞体积 $\Omega = a^3/2$,




| 层 | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 |
|---|---|---|---|---|---|
| 符号 | ○ | ⊗ | ● | ⊖ | ○ |
| 原子 | As | Ga | P | Ga | As |

相邻两层的间距是 $\frac{a}{4}$

图 9-9　图 9-5 结构在(001)面上原子排列投影图

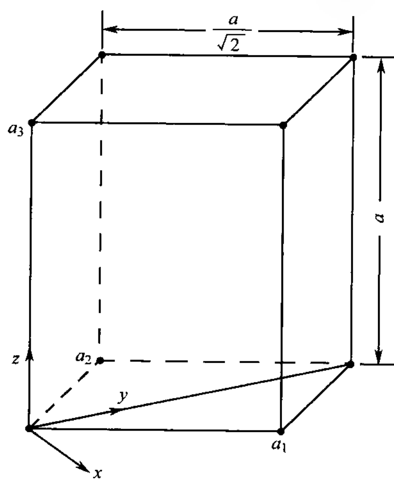



图 9-10　超晶格原胞示意图

$$\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3 = \frac{a^2}{2}(\boldsymbol{j}+\boldsymbol{i}),\boldsymbol{a}_3 \times \boldsymbol{a}_1 = \frac{a^2}{2}(\boldsymbol{j}-\boldsymbol{i})$$

$$\boldsymbol{a}_1 \times \boldsymbol{a}_2 = \frac{a^2}{2}\boldsymbol{k}$$

故

$$
\begin{cases}
\boldsymbol{b}_1 = 2\pi \dfrac{\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3}{\Omega} = \dfrac{2\pi}{a}(\boldsymbol{i}+\boldsymbol{j}) \\
\boldsymbol{b}_2 = 2\pi \dfrac{\boldsymbol{a}_3 \times \boldsymbol{a}_1}{\Omega} = \dfrac{2\pi}{a}(-\boldsymbol{i}+\boldsymbol{j}) \\
\boldsymbol{b}_3 = \dfrac{2\pi}{a}\boldsymbol{k}
\end{cases}
\tag{2}
$$

比较式(1)和式(2)可以看出,倒格子也是简单正方格子。

(4) 参考图 9-10 可以看出,位于坐标原点的倒格点,在 $k_x - k_y$ 平面上 4 个最近邻格点的倒格矢为$\pm\boldsymbol{b}_1$,$\pm\boldsymbol{b}_2$,或写成

$$\boldsymbol{K}_{\mathrm{n}} = \pm\frac{2\pi}{a}(\boldsymbol{i}+\boldsymbol{j}), \boldsymbol{K}_{\mathrm{n}} = \pm\frac{2\pi}{a}(-\boldsymbol{i}+\boldsymbol{j})$$

在 $k_z$ 轴上两个最近邻格点的倒格矢为$\pm\boldsymbol{b}_3$,或写成

$$\boldsymbol{K}_{\mathrm{n}} = \pm\frac{2\pi}{a}\boldsymbol{k}$$

根据 $\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{K}_{\mathrm{n}}=\frac{1}{2}\boldsymbol{K}_{\mathrm{n}}^2$,写出这 6 个倒格矢的中垂面的方程式,即

$$k_x + k_y = \pm\frac{2\pi}{a}, -k_x + k_y = \pm\frac{2\pi}{a}$$

$$k_z = \pm\frac{1}{2}\left(\frac{2\pi}{a}\right)$$

它们围成的正方柱体,就是超晶格结构(Ga-As)－$(GaP)_1$ 的第一布里渊区,如图 9-11所示。

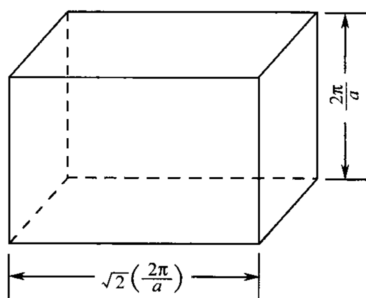



图 9-11　超晶格$(GaAs)_1$－$(GaP)_1$ 的第一布里渊区

# 第 10 章　半导体的光学性质、光电和发光现象

**主题词**

半导体光学常数，光吸收及吸收机构，光电导、定态光电导和它的弛豫过程、弛豫时间，光生伏特效应和 pn 结光电池，半导体发光和 pn 结发光二极管，半导体激光和获得激光的条件。

## 10.1　理论概要与重点分析

(1) 半导体与光的相互作用可以用一些光学常数来描写。

① 光进入半导体要发生折射，用折射率来描写，定义其复折射率

$$N = n - \mathrm{i}k \tag{10.1}$$

其中 $n$ 为通常折射率，$k$ 为消光系数，即

$$n = \frac{1}{2}\varepsilon_r\left[1 + \left(1 + \frac{\sigma^2}{\omega^2\varepsilon_r^2\varepsilon_0^2}\right)^{\frac{1}{2}}\right] \tag{10.2}$$

$$k = -\frac{1}{2}\varepsilon_r\left[1 - \left(1 + \frac{\sigma^2}{\omega^2\varepsilon_r^2\varepsilon_0^2}\right)^{\frac{1}{2}}\right] \tag{10.3}$$

对绝缘体，电导率 $\sigma = 0, n = \sqrt{\varepsilon_r}, k = 0$；

对导体或半导体，$\sigma \neq 0, k \neq 0$，标志光进入导体或半导体其强度发生衰减，存在吸收。

② 光在半导体中传播其强度发生衰减，在 $x$ 处，单位长度吸收掉的光强度与该处的光强度成正比，即

$$\frac{\mathrm{d}I}{\mathrm{d}x} = -\alpha I(x) \tag{10.4}$$

比例系数 $\alpha$ 为半导体对光的吸收系数，由式(10.4)解出

$$I = I_0 \mathrm{e}^{-\alpha x} \tag{10.5}$$

由于光被吸收，其强度随深入样品的距离呈指数式衰减。实际上，$\frac{1}{\alpha}$是光子深入样品的平均距离。

③ 光进入或射出半导体界面时，一部分会反射回原媒质，反射强弱用反射系数 $R$ 表示。

$$R = \frac{\text{界面反射光强度}}{\text{入射光强度}} \tag{10.6}$$

④ 在界面上除了光的反射，一部分要透射进入半导体，用透射系数 $T = 1 - R$ 表示。对一个厚度为 $d$ 的半导体样品，一束强度为 $I_0$ 的光经过反射、透射、再反射，再透射的多

过程作用，透射出另一面的透射系数

$$T = \frac{\text{透射光强度}}{\text{入射光强度}} = (1-R)^2 e^{-\alpha d} \tag{10.7}$$

(2) 光进入半导体后，在传播过程中，光子能量会被电子所吸收，而跃迁到更高的能态上去，这种光吸收过程必须满足能量和动量守恒。光吸收发生跃迁的机制可以有多种形式。

① 本征吸收。它是最重要的一种吸收，是指价带中的电子吸收能量为 $h\nu$ 的光子后，直接跃入导带。要发生本征吸收，光子的能量必须满足

$$h\nu \geqslant h\nu_0 = E_g \tag{10.8}$$

即是说光波的频率必须大于 $\nu_0$ 或波长必须小于

$$\lambda_0 = \frac{1.24}{E_g(\text{eV})}(\mu\text{m}) \tag{10.9}$$

才能发生本征吸收，把 $\lambda_0$ 称为本征吸收长波限。

跃迁前后，电子有各自的波矢，设跃迁前电子在价带中的波矢为 $\boldsymbol{k}$，跃迁后在导带中为 $\boldsymbol{k}'$。如果

$$\boldsymbol{k}' = \boldsymbol{k} \tag{10.10}$$

即跃迁前后的准动量不发生变化的跃迁，在能带图上是竖直的称为直接跃迁，这种跃迁对直接带隙半导体(如 GaAs)一开始本征吸收就是直接跃迁。由于它仅限于电子和光子的相互作用，而不需要第三者参与，所以其吸收效率是很高的，吸收系数可达 $10^4 \sim 10^6\,\text{cm}^{-1}$。

如果吸收前后电子的波矢不等，在吸收光子能量达到能量守恒的同时，必须吸收或发射一个声子，即

$$\boldsymbol{k}' - \boldsymbol{k} = \pm \boldsymbol{q} \tag{10.11}$$

以达到动量守恒。其中 $\boldsymbol{q}$ 为格波声子波矢。这种跃迁在能带图上是非竖直的，因而称为间接跃迁。发生间接跃迁，必须要声子参与，是一个二级过程。因此它的吸收效率要低一些，吸收系数一般在 $1\sim10^3\,\text{cm}^{-1}$的量级，例如 Ge，Si 等间接带隙半导体，刚达长波限的光子发生的本征吸收必须声子参与才能实现这种跃迁。式(10.10)和式(10.11)分别是直接和间接跃迁的选择定则。

本征吸收的特点是：电子一空穴成对产生，要产生附加光电导，有明显的长波限，吸收短于长波限的连续光谱，吸收满足选择定则。

② 激子吸收。吸收 $\lambda_0$ 以外长波方向的线状谱，不产生附加光电导，在低温、高纯半导体中才能观察到。

③ 自由载流子吸收。在同一能带中，电子吸收光子从低能级跃迁到高能级。发生在红外长波方面，波长越长吸收系数越大，电子的波矢要发生改变。

熟知的半导体，Ge、Si、GaAs 等，价带有三个重叠的能带组成。对 p 型半导体，自由载流子红外吸收光谱，有三个直接跃迁的吸收峰，对这种现象的分析，实际上是确定价带具有重叠结构的重要依据。

④ 杂质吸收。在杂质能级上的电子吸收光子跃入导带，价带电子跃入杂质能级，受主电子跃入电离施主等多种形式。由于杂质能级上电子无确定的准动量，所以这种跃迁均为一级过程，吸收有确定长波限连续谱。

⑤ 晶格振动吸收。晶格吸收电磁波能量，加强晶格振动，发生在远红外区。

(3) 从光吸收机制来看，很多情况都产生光生载流子，而产生附加光电导率

$$\Delta\sigma = q(\Delta n\mu_n + \Delta p\mu_p) \tag{10.12}$$

光电导率与平衡时电导率之比，为光电导的相对值。

$$\frac{\Delta\sigma}{\sigma_0} = \frac{(1+b)\Delta n}{bn_0 + p_0} \tag{10.13}$$

利用光电导增加现象可制成光敏电阻，要使光敏电阻的灵敏度高，其相对光电导要大，从式(10.13)可知，光敏电阻应用高阻材料制成。

① 研究光电导有三个方面的内容。

首先是光敏电阻的灵敏度，即定态光电导与半导体材料参数及光强度的关系；其次是光敏电阻对光的频率响应，用所谓光电导的弛豫时间来衡量；第三是光电导的光谱分布，有本征光电导和杂质光电导之分，各种半导体的光电导都有各自的光谱分布，利用这些资料，我们可以很好地选择半导体材料来制成光敏电阻，使其对我们所要探测的光最灵敏。光谱分布有等能量和等量子两种测试方法。

② 定态光电导及其弛豫过程。

由于光生载流子有一定的寿命，从光照开始光生载流子为零逐渐增加，经过一段时间而达到稳定值(定态)；光照停止，光生载流子从稳定态逐渐衰减而最后消失，由于光电导和光生载流子浓度成正比，这种光生载流子逐渐上升和下降的过程，就称为光电导的弛豫过程。

在小注入条件下：

上升
$$\Delta n = \tau_n I\alpha\beta(1 - e^{-\frac{t}{\tau_n}}) = \Delta n_s(1 - e^{\frac{t}{\tau_n}}) \tag{10.14}$$

下降
$$\Delta n = \tau_n I\alpha\beta(e^{\frac{t}{\tau_n}}) = \Delta n_s(e^{-\frac{t}{\tau_n}}) \tag{10.15}$$

在上升中，当 $t \gg \tau_n$ 时，$\Delta n = \tau I\alpha\beta = \Delta n_s$，为光生载流子定态值。当 $t = \tau_n$ 时，上升到定态的 63%，下降到定态的 37%，因此我们可以把寿命 $\tau$ 作为弛豫时间。

在强注入条件下：

上升
$$\Delta n = \left(\frac{I\alpha\beta}{r}\right)^{\frac{1}{2}} t_g h[(\beta\alpha Ir)^{\frac{1}{2}} t] = \Delta n_s t_g h[(\beta\alpha Ir)^{\frac{1}{2}} t] \tag{10.16}$$

下降
$$\Delta n = \left(\frac{\beta\alpha I}{r}\right)^{\frac{1}{2}} \left[\frac{1}{1 + (\beta\alpha Ir)^{\frac{1}{2}} t}\right] = \Delta n_s \left[\frac{1}{1 + (\beta\alpha Ir)^{\frac{1}{2}} t}\right] \tag{10.17}$$

同样 $\Delta n_s = \left(\frac{I\alpha\beta}{r}\right)^{\frac{1}{2}}$ 为光生载流子的定态值。

当 $t = (\beta\alpha Ir)^{-\frac{1}{2}}$ 时，上升到定态值的 76%，下降到定态值的 50%，所以可把 $(\beta\alpha Ir)^{-\frac{1}{2}}$ 作为强注入的弛豫时间。

由此可见：

小注入时的定态值　　　$\Delta n_s = \beta\alpha I \cdot \tau$

强注入时的定态值　　　$\Delta n_s = \left(\frac{\beta\alpha I}{r}\right)^{\frac{1}{2}} = I\beta\alpha \cdot (Ir\beta\alpha)^{-\frac{1}{2}}$

式中，$\beta\alpha I$ 是载流子的产生率，$\tau$ 和$(\beta\alpha Ir)^{-\frac{1}{2}}$ 分别是小注入和强注入的弛豫时间，两种情况的定态值可总结为

$$\Delta n_s = 产生率 \times 弛豫时间 \tag{10.18}$$

弛豫时间越长，定态光电导越大，灵敏度越高，而弛豫时间越长，光敏电阻对一个迅速变化的光信号反应越慢，即使用频响低，反之亦然。

(4) 当半导体有内建电场时，光生电子和空穴会被电场分开，从而在两端产生电势差，称为半导体的光生伏特效应。最简单而又被广泛利用的为 pn 结光电池。

由于 pn 结势垒区存在由 n 区指向 p 区的自建电场，当适当波长的光照射于 pn 结时，在势垒区内产生的电子被电场扫入 n 区，空穴扫入 p 区；在 p 型和 n 型扩散区内产生的电子和空穴首先扩散至势垒边界，然后再被电场分别扫入 n 区和 p 区，于是建立起一个 p 区为正，n 区为负的电势差，称它为光电压。如果将用电器外接于 pn 结的两边，在持续的光照下，会有源源不断的电流从 p 型一端经用电器流入 n 型一端。如将用电器短路，所有通过结面流入对方的载流子都经过短路线复合，这时的电流最大，称为短路电流。在理想情况下，忽略相对薄的势垒区的贡献，短路电流等于光电流。

$$I_L = qQA(L_n + L_p) \tag{10.19}$$

式中，$Q$ 为两个扩散区内光生载流子的平均产生率，$A$ 为 pn 结的面积。如果负载电阻为 $R_L$，流过电流为 $I$，在两端的压降为 $V$，则外电流

$$I = I_L - I_f = I_L - I_s\left(e^{\frac{qV}{k_0 T}} - 1\right) \tag{10.20}$$

式中，$V$ 为光电压，也是加在 pn 结上的正向电压，这就是光电池的伏安特性。

当 $R_L$ 从 $0 \to \infty$ 变化时，电流从最大的短路电流变到零，电压从零变到最大的开路电压 $V_{0c}$，将 $I = 0, V = V_{0c}$ 代入式(10.20)

$$V_{0c} = \frac{k_0 T}{q}\ln\left(\frac{I_L}{I_s} + 1\right) \tag{10.21}$$

伏安特性上的最大功率输出点的功率与输入光功率之比

$$\eta = \frac{I_{pm}V_{pm}}{p_{in}} \tag{10.22}$$

称为光电池的效率。

(5) 处于高能态的过剩载流子，跃迁到低能态与空穴复合而释放能量，这种能量如果以辐射形式放出，则产生发光现象。发光是吸收的逆过程。要使发光持续进行，必须要有某种作用将低能态电子提升到高能态，这种提升作用可以是电、光、高能粒子辐射等，分别称其为电致发光、光致发光和辐射发光等。

最重要的是 pn 结注入的电致发光，用它可作为 pn 结发光二极管。异质结有更高的注入效率，因而异质结注入发光获得更为广泛应用。

辐射跃迁的过程可分为:有杂质参与的跃迁,带与带之间的跃迁和热载流子在带内的跃迁等,其中以带-带跃迁、施主和受主之间的跃迁发光效率较高。研究不同材料的辐射跃迁机制和发射光谱,对制造不同颜色的发光器件具有重要意义。电子从高能态跃迁到低能态,不一定都发射光子,作为发光器件只有发射光子的辐射跃迁才是有意义的,因而有个发射效率的问题。它用两个量子效率描写,即内量子效率和外量子效率,在高的内量子效率前提下,才能有高的外量子效率。要提高外量子效率往往在器件的结构上采用最佳形式。

(6) 激光是"辐射受激发射光量子放大"的简称,是一种亮度极高,方向性和单色性很好的相干辐射。只有受激辐射,才能产生频率、位相、方向、偏振态完全相同的光子。一定频率的光子流在半导体中传播时,吸收和受激辐射是同时存在的,只有受激辐射占有优势的情况下才能产生光量子放大。经理论分析证明,在禁带宽度为 $E_g$ 的半导体中某些部位,注入光子的能量满足

$$E_g \leqslant h\nu \leqslant E_F^n - E_F^p \tag{10.23}$$

的条件下才有可能。这种反常状况,叫做"分布反转"。

要实现分布反转,利用两边都重掺杂的 pn 结正向高注入在结面附近一定区域可达到 $E_F^n - E_F^p > E_g$ 的状态。

要真正达到发射激光的要求,还必须有一个长度为半波长整数倍的共振腔和达到阈值的注入电流。

共振腔长度

$$l = m\left(\frac{\lambda}{2n}\right) \tag{10.24}$$

式中,$\frac{\lambda}{n}$ 是辐射光在半导体中的波长。

达到阈值电流使增益至少要等于损耗

$$g_t l = \alpha l + \ln\left(\frac{1}{R}\right) \tag{10.25}$$

$g_t$ 是阈值增益系数。当注入电流达到阈值 $J_t$ 时,增益系数达到 $g_t$。$g_t l$ 代表增益,$\alpha l$ 代表吸收损耗,$\ln\left(\frac{1}{R}\right)$ 代表端面透射损耗。

用异质结的注入效率高的特点,降低阈值电流密度多采用二元、三元或四元化合物半导体制成单、双异质结激光器。

## 10.2 概念思考与练习题

**【10-1】** 在宏观上光与半导体的相互作用用哪几个光学常数来描写?试分别说明它们的物理意义。

**【10-2】** 一束强度为 $I_0$ 的光垂直入射一块厚度为 $d$ 的半导体表面,设两面的反射系数均为 $R$,证明这块半导体总的透射系数为

$$T=\frac{(1-R)^2 e^{-\alpha d}}{1-R^2 e^{-2\alpha d}}$$

在一级近似下

$$T=(1-R)^2 e^{-\alpha d}$$

其中 $\alpha$ 为吸收系数。

**【10-3】** 半导体对光的吸收有哪几种主要过程？哪些过程具有确定的长波吸收限？写出对应的波长表达式。哪些具有线状吸收光谱？哪些光吸收对光电导有贡献？

**【10-4】** 在本征吸收中，电子吸收光子时可能出现直接和间接（竖直和非竖直）两种跃迁形式，分别写出在这两种跃迁中电子应满足的能量和动量守恒关系式。并由此说明这两种跃迁的物理性质。

**【10-5】** Ge 和 GaAs 对光的吸收系数与光子能量关系的实验曲线如图 10-1 所示。根据它们的能带结构对曲线的变化规律予以解释和说明。

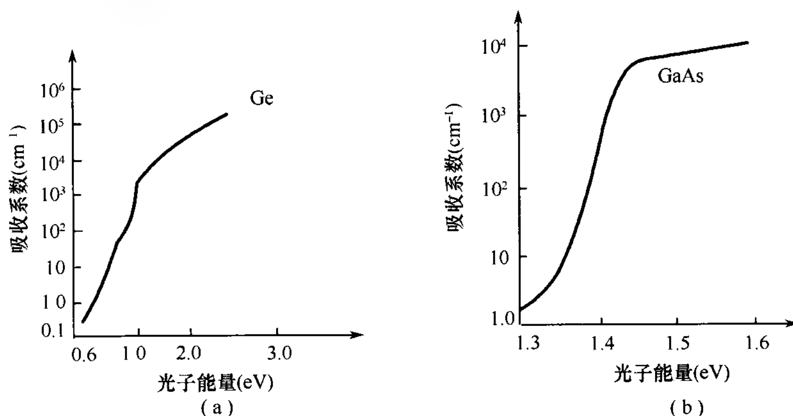



图 10-1　题 10-5 用图

**【10-6】** 使半导体材料 Si、Ge 和 GeAs 在光照下能够产生电子—空穴对的光最大波长为多少？

**【10-7】** 什么是光电导，光电导的驰豫过程，光电导的驰豫时间？定态光电导和驰豫时间的关系如何？这种关系对设计光敏器件有何指导意义？

**【10-8】** (1) 以 pn 光电池为例。试述光生伏特效应产生的原理；

(2) 画出理想 pn 结光电池工作的等效电路，推导出其伏安特性方程并画出对应的特性曲线；

(3) pn 结光电二极管的电流相应于正偏置还是反偏置的二极管电流；

(4) 对于不同能量光照，其曲线如何变化？

**【10—9】** D-A 对复合发光的光子能量：

$$h\nu=E_g-(E_A+E_D)+\frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_r r}$$

式中 $E_A$ 和 $E_D$ 分别为受主杂质和施主杂质的束缚能，$r$ 为施受主杂质的空间距离，试由此式分析这类发光的主要光谱特征。

对于 $E_g = 2.24\text{eV}$ 的 GaP 来说，氧为深施主，$E_D = 0.896\text{eV}$，锌为浅受主，$E_A = 0.064\text{eV}$，掺有相同数量氧和锌的 GaP 受激后发出能量是 1.8eV 左右的红光。这是施主—受主对交合发光吗？若是，为什么？若否，试解释其发光机理。

**【10-10】** 比较光电池、光敏电阻和发光二极管的工作原理，根据讨论结果，说明其电流一电压特性曲线的变化范围。

**【10-11】** 什么是半导体发光？一般分为几种形式？

**【10-12】** 区别自发辐射和受激辐射。说明粒子分布反转的物理意义。

**【10-13】** 如以 $E_F^n$、$E_F^p$ 分别表示半导体非平衡态下电子及空穴的准费米能级，试证明，在半导体导带与价带之间实现粒子数分布反转的条件为 $E_F^n - E_F^p > E_g$。举例说明实现粒子分布反转的方法。

**【10-14】** 半导体 pn 结激光器要产生激光必须满足哪几个条件？各用什么方法实现？

**【10-15】** 画出图 10-2 所示条件下光电流在外电路的流动方向(设光照可以穿透整个 pn 结)。

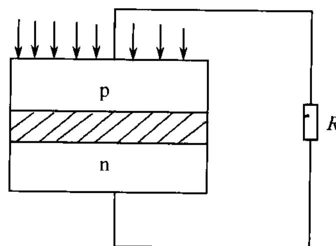


图 10 2　题 10-15 用图

**【10-16】** 为什么异质结比同质 pn 结注入效率高？试画出能带图予以说明。

**【10-17】** (1) 图 10-3 为两种不同禁带宽度的半导体材料，试画出异质 np 结能带图。

(2) 当太阳光照在由上述材料组成如图 10-4 所示的两种结构光电池时，试问：哪种结构的光电池对太阳能利用率较高？为什么？

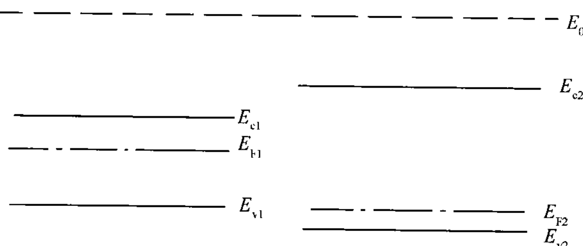


图 10-3　题 10-17(1)用图

**【10-18】** 如图 10-5 所示，用低于 $h\nu_0 = E_g$ 的某一频率 $\nu_1$ 的光照射半导体样品时，发现有明显光吸收，但同时发现有光照和无光照时的电压表的指针不动(表示数值基本不变)。试说明此现象的物理本质。

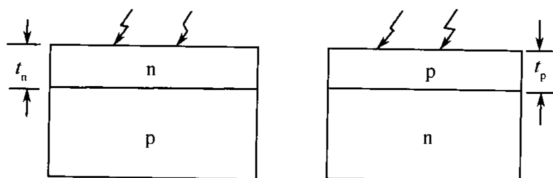


图 10-4　题 10-17(2)用图

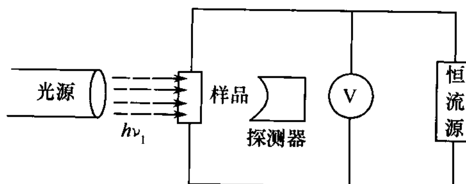


图 10 5　题 10-18 用图

【10-19】 有人说:"Ge 和 Si 是间接带隙半导体,所以它们的本征光吸收只有电子的间接跃迁,不能发生电子的直接跃迁。"你认为此说法如何? 为什么?

【10-20】 如图 10-6 所示的两种异质结发光二极管,试问哪一种结构形式更合理一些? 为什么?

【10-21】 鉴于光吸收与光发射是相反的关系,试解释为什么在重掺杂的补偿型半导体中观察不到从受主到施主跃迁引起的光吸收,虽然在发射过程中,由施主到受主的跃迁是一个主导的过程。

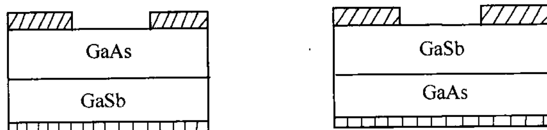



图 10-6 题 10 20 用图

## 10.3 典型例题解析

【例 10-1】 真空中一电磁波,它的场分量为

$$\mathscr{E}_y = B_z = A\exp[\mathrm{i}(\omega t - kx)]$$

垂直射入一介质面上,并在面上反射,此介质的相对介电常数为 $\varepsilon_r$,相对磁导率 $\mu_r = 1$,充满 $x \geqslant 0$ 的半空间,试证反射系数

$$R = \frac{(n-1)^2 + \bar{k}^2}{(n+1)^2 + \bar{k}^2}$$

**证明:** 利用式(11-4)、式(11-5)可将电场分量写成

$$\mathscr{E}_y = \mathscr{E}_y^0 \mathrm{e}^{-\frac{\omega}{c}\bar{k}x} \mathrm{e}^{-(t-\frac{nx}{c})} \tag{1}$$

相应的磁场分量为

$$B_z = (n - \mathrm{i}\bar{k})\mathscr{E}_y^0 \mathrm{e}^{-\frac{\omega}{c}\bar{k}x} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t-\frac{nx}{c})} \tag{2}$$

在 $x < 0$ 的空间中电磁波为入射波及反射波的叠加,即

$$\mathscr{E}_y^1 = \mathscr{E}_\mathrm{i}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t-\frac{x}{c})} + \mathscr{E}_\mathrm{r}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t+\frac{x}{c})} \tag{3}$$

$$B_z^1 = \mathscr{E}_\mathrm{i}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t-\frac{x}{c})} - \mathscr{E}_\mathrm{r}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t+\frac{x}{c})} \tag{4}$$

在表面 $x = 0$ 处,应满足连续条件

$$\mathscr{E}_y = \mathscr{E}_y{}', B_z = B_z{}' \tag{5}$$

将式(1)~式(4)代入式(5)得

$$\mathscr{E}_z^0 = \mathscr{E}_\mathrm{i} + \mathscr{E}_\mathrm{r} \tag{6}$$

$$(n - \mathrm{i}k)\mathscr{E}_z^0 = \mathscr{E}_\mathrm{i} - \mathscr{E}_\mathrm{r} \tag{7}$$

从式(6)、式(7)并根据反射系数定义得

$$R = \left|\frac{\mathscr{E}_\mathrm{r}}{\mathscr{E}_\mathrm{i}}\right|^2 = \frac{(n-1)^2 + \bar{k}^2}{(n+1)^2 + \bar{k}^2} \tag{8}$$

【例 10-2】 试导出吸收系数 $\alpha$ 与消光系数 $\bar{k}$ 之间的关系。

**解：** 在有吸收的介质中沿 $z$ 方向传播的波可以写成

$$E_x = E_0 \exp(-\omega \bar{k} z/c) \exp[\mathrm{i}\omega(t - nz/c)]$$

另外，光的强度与电场强度平方成正比，即

$$I \propto \exp(-2\omega \bar{k} z/c) \tag{1}$$

由实验确定光沿 $z$ 方向在有吸收的介质中传播时满足

$$I \propto \exp(-\alpha z) \tag{2}$$

比较式(1)、式(2)两式，得

$$\alpha = 2\omega \bar{k}/c = 4\pi \bar{k}/\lambda$$

式中 $\lambda$ 为真空中的波长。

【例 10-3】 根据晶体中电子的运动方程，利用经典理论证明自由载流子吸收的吸收系数与光波长的平方成正比。

**解：** 设电子有效质量为 $m_{\mathrm{n}}^*$、浓度为 $n$、弛豫时间为 $\tau_{\mathrm{n}}$，在光的电场 $\mathscr{E}$ 的作用下在 $x$ 方向运动方程式为

$$m_{\mathrm{n}}^* \frac{\mathrm{d}^2 x}{\mathrm{d}t^2} + \frac{m_{\mathrm{n}}^*}{\tau_{\mathrm{n}}} \frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = -q\mathscr{E}$$

如果 $x \propto \exp(\mathrm{i}\omega t)$，则可得

$$x = \frac{q\mathscr{E}}{m_{\mathrm{n}}^*(\omega^2 - \mathrm{i}\omega/\tau_{\mathrm{n}})}$$

在电场作用下半导体的极化强度为 $p = -qnx$，电位移矢量的大小为 $D = \varepsilon_0 \mathscr{E} + P = \varepsilon_0 \varepsilon_{\mathrm{r}} \mathscr{E}$，由此可得相对介电常数的表达式为

$$\varepsilon = 1 - \frac{nqx}{\varepsilon_0 \mathscr{E}} = 1 - \frac{nq^2}{m_{\mathrm{n}}^* \varepsilon_0 (\omega^2 - \mathrm{i}\omega/\tau_{\mathrm{n}})}$$

$\varepsilon$ 的虚部为

$$\varepsilon_2 = \frac{nq^2}{\varepsilon_0} \frac{1/\omega\tau_{\mathrm{n}}}{m_{\mathrm{n}}^* \omega^2 [1 - (1/\omega/\tau_{\mathrm{n}})^2}$$

当频率很高时可近似写成

$$\varepsilon_2 = \frac{nq^2}{m_{\mathrm{n}}^* \varepsilon_0 \tau_{\mathrm{n}} \omega^3}$$

根据吸收系数 $\alpha$ 与 $\varepsilon_2$ 的关系，得

$$\alpha = \frac{\omega \varepsilon_2}{c\bar{n}} = \frac{nq^2}{m_{\mathrm{n}}^* \varepsilon_0 \bar{n} \omega^2 c \tau_{\mathrm{n}}}$$

利用 $\omega = 2\pi c/\lambda$ 及 $\mu_{\mathrm{n}} = q\tau_{\mathrm{n}}/m_{\mathrm{n}}^*$ 得

$$\alpha = \frac{nq^3}{4\pi c^3 \varepsilon_0 m_{\mathrm{n}}^{*2} \bar{n} \mu_{\mathrm{n}}} \lambda^2$$

即自由载流子的光吸收系数与波长平方成正比。

【例 10-4】 光照射光导电体时，如果单位体积、单位时间内产生 $f$ 个电子—空穴对，

电子和空穴的寿命分别为 $\tau_n \cdot \tau_p$ 时，试证明电导率增加部分 $\Delta\sigma = e \cdot f(\mu_n\tau_n + \mu_p\tau_p)$。

**解**：光照射时，如果电子密度和空穴密度的增加分别为 $\Delta n$ 和 $\Delta p$，那么电导率的增加部分 $\Delta\sigma$ 由下式表达

$$\Delta\sigma = e(\mu_n\Delta n + \mu_p\tau_p)$$

另外，电子密度的增加部分 $\Delta n$ 的计算如下。因为光照射产生的电子寿命为 $\tau_n$，所以电子产生后经过 $t$ 时间，电子密度减少 $e^{-\frac{t}{\tau_n}}$。如果连续进行光照射时，那么，在某一时刻 $t$ 的电子密度等于当时产生的电子密度 $f$ 和在这以前产生的电子所剩下来的部分的总和，也就是 $t_1$ 时间以前产生的电子密度经过 $t$ 时间后减少到 $f \cdot e^{-\frac{t}{\tau_n}}$。因此，在 $t$ 时刻的电子密度等 $t_1$ 从 0 ～∞之间的电子的总和，也就是

$$\Delta n = \int_0^\infty f \cdot e^{-\frac{t}{\tau_n}} \cdot dt = f\left[-\tau_n \cdot e^{-\frac{t}{\tau_n}}\right]_0^\infty$$

$$= f \cdot \tau_n$$

同理，空穴密度的增加部分 $\Delta p$ 为

$$\Delta p = f \cdot \tau_p$$

因此，

$$\Delta\sigma = ef(\mu_n\tau_n + \mu_p\tau_p)$$

**【例 10-5】** 在光导电体两端加一定电压的情况下，光照射时，假如单位时间内整个光导电体中产生 $F$ 个电子（空穴忽略），试证明光电流 $\Delta I$（光照射时，电流增加部分称为光电流）可由下式得出

$$\Delta I = e \cdot G \cdot F$$

其中

$$G = \frac{\tau_n}{t}$$

为增益系数，$\tau_n$ 为电子的寿命，$t$ 为所产生的电子飞越电极间所需要的时间。

**解**：光导电体长为 $L$，截面积为 $S$，两端电压为 $V$，电场强度为$\mathscr{E}$时，根据欧姆定律

$$\Delta I = \Delta\sigma \cdot S\frac{V}{L} = \Delta\sigma \cdot S \cdot \mathscr{E}$$

光照射光电导体时，若单位体积内单位时间中产生了 $f$ 电子—空穴对，设电子和空穴寿命各为 $\tau_n$、$\tau_p$ 时，电导率的增加部分 $\Delta\sigma = e \cdot f(\mu_n\tau_n + \mu_p\tau_p)$，忽略空穴时有

$$\Delta\sigma = ef\mu_n\tau_n$$

$$= e \cdot \frac{F}{L \cdot S}\mu_n\tau_n \qquad (\text{因为 } F = f \cdot L \cdot S)$$

因此，有

$$\Delta I = e \cdot \frac{F}{L \cdot S} \cdot \mu_n \cdot \tau_n \cdot S \cdot \mathscr{E}$$

$$= e \cdot \frac{\tau_n}{\frac{L}{\mu_n\mathscr{E}}} \cdot F = e\frac{\tau_n}{t}F = eGF$$

因为 $\mu_n \mathscr{E}$ 为电子的漂移速度，所以 $t = L/\mu_n \mathscr{E}$ 是电子飞越电极间的时间。

**【例 10-6】** 一重掺杂 n 型半导体的平衡载流子浓度为 $n_0$ 和 $p_0$，恒定光照下，产生的电子—空穴对数为 $Q/\text{cm}^3 \cdot \text{s}$，复合系数为 $\gamma$。今另加一闪光，产生附加光载流子的浓度为 $\Delta n = \Delta p$ ($\ll n_0$)。试证，闪光 $t$ 秒后，样品内空穴浓度为

$$p(t) = p_0 + \Delta p \mathrm{e}^{-rn_0 t} + \frac{Q}{rn_0}$$

**证明：**

$$\text{复合率} = rnp = r(n_0 + \Delta n)(p_0 + \Delta p)$$
$$= rn_0 p_0 + r(n_0 + p_0)\Delta p + r(\Delta p)^2$$
$$\Delta n = \Delta p$$

又因为该材料为重掺材料，所以 $n_0 \gg p_0$，故上式可简化为

$$\text{复合率} = rnp \approx rn_0 \Delta p + rn_0 p_0$$

平衡时：产生率 $G = rn_0 p_0$（即平衡时：产生率＝复合率），所以

$$\text{净复合率} = \text{复合率} - \text{产生率} = rn_0 \Delta p + rn_0 p_0 - rn_0 p_0$$

即净复合率 $= rn_0 \Delta p$。

当光照达到稳定后，产生率＝复合率，所以

$$Q = rn_0 \Delta p$$

即

$$\Delta p = \frac{Q}{rn_0}$$

设 $t = 0$ 时刻，加一闪光，即

$$\Delta p(t)\big|_{t=0} = \Delta p(0) = \Delta p + \frac{Q}{rn_0}$$

（注：式中 $\Delta p$ 为脉冲光照产生的空穴）

已知：$\Delta p(t)$ 满足的方程为

$$\frac{\mathrm{d}\Delta p(t)}{\mathrm{d}t} = Q - rn_0 \Delta p(t)$$

解此方程

$$-\frac{1}{rn_0} \frac{\mathrm{d}[Q - rn_0 \Delta p(t)]}{Q - rn_0 \Delta p(t)} = \mathrm{d}t$$

两端积分得

$$\ln[Q - rn_0 \Delta p(t)] = -rn_0 t + C'$$

故

$$Q - rn_0 \Delta p(t) = C\mathrm{e}^{-rn_0 t}$$

即

$$\Delta p(t) = \frac{Q}{rn_0} - \frac{C}{rn_0} \mathrm{e}^{-rn_0 t}$$

又因为 $t = 0$，且 $\Delta p(0) = \dfrac{Q}{rn_0} + \Delta p$，所以

$$\frac{Q}{rn_0} + \Delta p = \frac{Q}{rn_0} - \frac{C}{rn_0}$$

故

$$C = -rn_0 \Delta p$$

代回原式即得

$$\Delta p(t) = \frac{Q}{rn_0} + \Delta p e^{-rn_0 t}$$

$$\Delta p(t) = p(t) - p_0$$

所以

$$p(t) = p_0 + \frac{Q}{rn_0} + \Delta p e^{-rn_0 t}$$

**【例 10-7】** 设棒状光电导体长为 $l$,截面积为 $S$,在光照下棒内均匀产生电子—空穴对数为 $Q/\text{cm}^3 \cdot \text{s}$,若在棒两端施加电压 $V$,试证光生电流与总电流之比为

$$\frac{\Delta I}{I} = \frac{1}{1 + (n_0 b + p_0)/Q(\tau_n b + \tau_p)}$$

式中 $b = \mu_n/\mu_p \cdot n_0$ 为平衡导带电子浓度。设光生载流子寿命 $\tau_n = \tau_p = 10^{-4}\text{s} \cdot Q = 10^{14}\text{cm}^{-3}$,估计 300K 下硅单晶的 $\Delta I/I$ 比值。

**证明:** 因样品的暗电导率为 $\sigma_0 = q(n_0\mu_n + p_0\mu_p)$,故暗电流为

$$I_0 = J_0 S = \sigma\varepsilon S = q(n_0\mu_n + p_0\mu_p)VS/l$$

设光生载流子与热平衡载流子有相同的迁移率,则光照下样品的附加电导率为

$$\Delta\sigma = q(\Delta n\mu_n + \Delta p\mu_p)$$

又因附加光生电子和光生空穴浓度可写为 $\Delta n = Q\tau_n, \Delta p = Q\tau_p$,故

$$\Delta\sigma = q(Q\tau_n\mu_n + Q\tau_p\mu_p)$$

因此光生电流为

$$\Delta I = \Delta J_0 S = \Delta\sigma\varepsilon S = qQ(\tau_n\mu_n + \tau_p\mu_p)VS/l$$

它与总电流之比为

$$\begin{aligned}\frac{\Delta I}{I} &= \frac{1}{1 + I_0/\Delta I} \\ &= \frac{1}{1 + (n_0\mu_n + p_0\mu_p)/Q(\tau_n\mu_n + \tau_p\mu_p)} \\ &= \frac{1}{1 + (n_0 b + p_0)/Q(\tau_n b + \tau_p)}\end{aligned}$$

在 300K 下本征硅中热平衡载流子浓度 $n_0 = p_0 = n_i = 1.5 \times 10^{10}\ \text{cm}^{-3}$,代入题给出数据,则

$$\begin{aligned}\frac{\Delta I}{I} &= \frac{1}{1 + n_i(b+1)/Q\tau_n(b+1)} = \frac{1}{1 + n_i/Q\tau_n} \\ &= 1/(1 + 1.5 \times 10^{10}/10^{14} \times 10^{-4}) = 1/2.5 = 40\%\end{aligned}$$

**【例 10-8】** 有 n 型 CdS 正方晶片,边长为 1mm,厚为 0.1mm,其波长吸收限为 5100Å。今用光强度为 $1\text{mW/cm}^2$ 的紫色光($\lambda = 4096$ Å)照射正方形表面,量子产额为 $\beta = 1$。设光生空穴全部被陷,光生电子寿命为 $\tau_n = 10^{-5}$ s,电子迁移率为 $\mu_n = 100\ \text{cm}^2/(\text{V} \cdot \text{s})$;并设光照能量全部被晶片吸收,求下列各值。

(1) 样品中每秒产生的电子—空穴对数;

(2) 样品中增加的电子数;

(3) 样品的电导增量 $\Delta g$;

(4) 当样品上加以 50V 电压时的光生电流,光电导增益因子。

**解:**

(1) 因为光照能量全部被吸收;所以在正方形样品表面上的入射光全部产生光电子。

又知:$\beta=1$,故:每秒中产生的电子—空穴对数 $Q=I$(以光子数目计),若用光子数表示光强(即单位面积上的光子数)。每一个光子的能量为

$$E_0 = h\nu = h\cdot\frac{c}{\lambda}$$

代入数据

$$E_0 = 6.62\times10^{-23}\times3\times10^{10}\times\frac{1}{4096\times10^{-8}}$$
$$=4.85\times10^{-12}(\text{erg})$$

所以 $E_0=4.85\times10^{-19}(\text{J})$

则 $I=\dfrac{1\times10^{-3}}{4.85\times10^{-10}}=2.07\times10^{15}[1/(\text{cm}^2\cdot\text{s})]$

已知样品面积为 $S=(10^{-1})^2=10^{-2}(\text{cm}^2)$

所以样品中每秒产生的电子—空穴对数为 $Q=S\cdot I$ 即

$$Q=2.07\times10^{15}\times10^{-2}=2.07\times10^{13}$$

(2) 样品中增加的电子数为

$$\Delta n'=Q\tau_n=2.07\times10^{13}\times10^{-3}=2.07\times10^{10}(\text{个})$$

而单位体积中增加的电子数

$$\Delta n=\frac{\Delta n'}{V}=\frac{2.07\times10^{10}}{10^{-4}}=2.07\times10^{14}[1/(\text{cm}^3\cdot\text{s})]$$

(3) 附加的电导率 $\Delta\sigma=\Delta nq\mu_n$

注意:$\Delta n$ 为单位体积中的电子数的增量。

所以

$$\Delta\sigma=2.07\times10^{14}\times1.6\times10^{-19}\times100$$
$$=3.3\times10^{13}(\text{S/cm})$$

电导增量

$$\Delta g=\Delta\sigma\cdot\frac{A}{l}=3.3\times10^{-3}\times\frac{10^{-3}}{10^{-1}}$$
$$=3.3\times10^{-5}(\text{S})$$

(注:电导可能沿两个方向计算,由于题目未说明,故按图 10-7 所示计算。)

因为 $J=\sigma\cdot E$,所以光生载流子引起的

$$J=\Delta\sigma\cdot E=\Delta\sigma\cdot\frac{A}{l}$$

又电流

$$I=J\cdot A$$
$$=\Delta\sigma\cdot\frac{A}{l}\cdot V$$

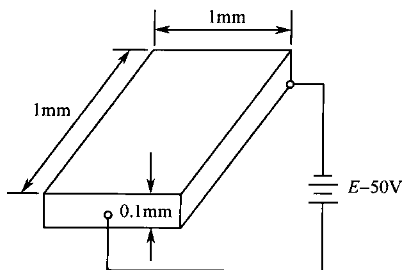



图 10-7　例 10-8 用图

$$= \Delta g \cdot V$$

故：光生电流 $I = \Delta g \cdot V = 50 \times 3.3 \times 10^{-5}$

$$= 1.65 \times 10^{-3}(\text{A})$$

即　　$I = 1.65(\text{mA})$

(4) 光电导增益因子

$$G = \frac{\tau_n}{\tau_t} = \frac{\tau_n \mu_n V}{l^2} = \frac{10^{-3} \times 100 \times 50}{10^{-2}} = 500$$

**【例 10-9】**　上题中无光照时电导 $g_0 = 10^{-8}$ S；如要样品的电导增加一倍，即 $\Delta g = g_0$，所需光照强度为多少？

**解**：因为光照媒质后，其衰减规律为

$$I = I_0 e^{-\alpha x}$$

式中，α 为衰减系数。

当 $x = \frac{1}{\alpha}$ 时，$I = \frac{I_0}{e}$，即光照能量全部被晶片吸收。

$$\alpha = \frac{1}{d}$$

又因为光照强度随透射的距离不同而异。所以，在不同平面上光生载流子数不同，因而各薄层电导不同(这里考虑如图 10-8 所示 $x$ 方向电导)。故

$$\Delta g = \int_{S_0}^{S} \Delta g' \cdot \frac{ds}{l}$$

$$= \int_0^{0.01} \Delta g' \frac{l\,dx}{l}$$

$$= \int_0^{0.01} \tau_n I \alpha \beta \mu_n dx$$

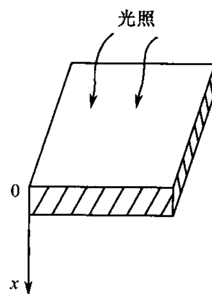



图 10-8　例 10-9 用图

将 $I = I_0 e^{-\alpha x}$ 代入上式，且认为在 $x=0.01$ 处光强为零，即光全部被吸收。

所以　　$$\Delta g = \tau_n I_0 \alpha \beta q \int_0^{0.01} e^{-\alpha x} dx = \tau_n I_0 \beta q \mu_n$$

$$I_0 = \frac{\Delta g}{\tau_n \beta \mu_n q}$$

令　　$$\Delta g = g_0$$

则　　$$I_0 = \frac{g_0}{\tau_n \beta q \mu_n}$$

代入数据

$$I_0 = \frac{10^{-2}}{10^{-3} \times 1.6 \times 10^{-19} \times 10^2}$$

$$= \frac{1}{1.6} \times 10^{12}[1/(\text{cm}^2 \cdot \text{s})]$$

若以能量计算，则每个光子能量 $E_0 = 4.85 \times 1^{-19}$ J，所以

$$I_0 = \frac{1}{1.6} \times 10^{12} \times 4.85 \times 10^{\ 19}$$

$$= 3 \times 10^{-7}(\mathrm{W/cm^2})$$

即

$$I_0 = 3 \times 10^{-4}(\mathrm{mW/cm^2})$$

**【例 10-10】** 计算衬底掺杂在 $10^{15}\mathrm{cm}^{-3}$ 和 $10^{18}\mathrm{cm}^{-3}$ 之间的硅 $\mathrm{n^+p}$ 结光电池的开路电压。假设 $L_s = 100\ \mu\mathrm{m}$，$D_n = 36\ \mathrm{cm^2/s}$，光电流密度 $I_L/A = 35\ \mathrm{mA/cm^2}$，这些参数与掺杂浓度无关。

**解：** 因为在 $\mathrm{n^+p}$ 结中 $N_D \gg N_A$，pn 结饱和电流的表示式可简化为

$$I_s = qAn_i^2\left(\frac{D_n}{L_pN_D} + \frac{D_n}{L_nN_A}\right) \approx \frac{qAn_i^2D_n}{L_nN_A}$$

$$= \frac{1.6 \times 10^{-19} \times A \times (1.5 \times 10^{19})^2 \times 36}{10 \times 10^{-4} \times N_A}$$

$$= \frac{1.3 \times 10^5 A}{N_A}(\mathrm{A/cm^2})$$

因此，开路电压 $V_{oc}$ 表示为

$$V_{oc} = \frac{k_0T}{q}\ln\left(1 + \frac{I_L}{I_s}\right) = 0.026\ln\left(1 + \frac{35 \times 10^{-3}AN_A}{1.3 \times 10^5 A}\right)$$

故有

| $N_A(1/\mathrm{cm}^3)$ | $10^{15}$ | $10^{16}$ | $10^{17}$ | $10^{18}$ |
|---|---|---|---|---|
| $V_{oc}(\mathrm{V})$ | 0.5 | 0.57 | 0.63 | 0.68 |

**【例 10-11】** 设激光共振腔长度为 $l$，端面反射系数为 $R$，激光材料对辐射的吸收系数为 $\alpha$，试证激光器的阈值增益为

$$G_t = \alpha + (1/l)\ln(1/R)$$

**证明：** 激光器内部损耗可用吸收系数 $\alpha$ 表征，端面损耗可用反射系数 $R$ 表征。

对于图 10-9 所示激光谐振腔，光强 $I(\nu,x)$ 沿 $x$ 方向传播，经距离 $\mathrm{d}x$，因增益引起的光强增量 $\mathrm{d}I_R$ 应与 $I(\nu,x)$ 及 $\mathrm{d}x$ 成正比，即

$$\mathrm{d}I_R = GI(\nu,x)\mathrm{d}x$$

式中 $G$ 为增益系数。同时因内部损耗而引起的光强减少量为

$$\mathrm{d}I_\alpha = \alpha I(\nu,x)\mathrm{d}x$$

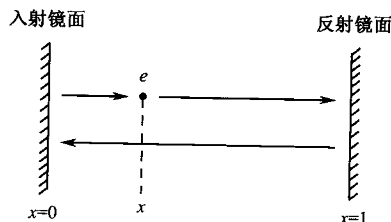


图 10-9　例 10-11 用图

因而光强总变化量为

$$\mathrm{d}I(\nu,x) = (G-\alpha)I(\nu,x)\mathrm{d}x$$

若工作物质均匀，可设 $G,\alpha$ 均不随位置变化，则由积分

$$\int_{I(\nu,0)}^{I(\nu,x)} \frac{\mathrm{d}I(\nu,x)}{I(\nu,x)} = (G-\alpha)\int_0^x \mathrm{d}x$$

得到

$$I(\nu,x) = I(\nu,0)e^{(G-\alpha)x}$$

它表明一个光子经过距离 $x$ 后，增长的概率为 $e^{(G-\alpha)x}$，且只有 $G > \alpha$，或者说只有当光在谐振腔内来回传播一次（经距离 $2l$）所得增益大于损耗时才能形成激光。

设腔内 $x$ 处的光强为 $I_0$ 的光，经过两次镜面反射又回到原处时光强为 $I_0R_1R_2\times\exp[(G-\alpha)2l]$，这里 $R_1$、$R_2$ 为两个端面反射系数。要维持激光增益至少应等于损耗，即

$$R_1R_2\exp[(G-\alpha)2l] \geqslant 1$$

或写成

$$G_t = \alpha + (1/2l)\ln(1/R_1R_2)$$

设 $R_1 = R_2 = R$，则阈值增益为

$$G_t = \alpha + (1/l)\ln(1/R)$$

这便是激光器形成激光的阈值条件。

**【例 10-12】** 设一块 n 型半导体材料，其室温暗电导率为 100 S/cm，当以强度 $I = 10^{-6}$ W/cm$^2$ 的光照射时，其吸收系数 $\alpha = 10^2$ /cm，测得其稳态光电导率与暗电导率之比 $\gamma = 10$，寿命 $\tau$ 为 $10^{-4}$ s，$b = \mu_n/\mu_p = 10$，$\mu_n = 10000$ cm$^2$/(V·s)，求对应的量子产额。

**解：** 暗电导率

$$\sigma_0 = q\mu_p(n_0b + p_0)$$

光照时的光电导率

$$\sigma = q\mu_p[(n_0 + \Delta n)b + (p_0 + \Delta p)]$$

光电导率与暗电导率之比

$$\gamma = \frac{\sigma}{\sigma_0} = 1 + \frac{\Delta n(1+b)}{n_0b + p_0}$$

因为定态光电导与光强满足线性关系

$$\Delta n = \beta\tau_n\alpha I$$

所以

$$\gamma = 1 + \frac{\beta\tau_n\alpha I(1+b)}{n_0b + p_0}$$
$$= 1 + \frac{\beta\tau_n\alpha I(1+b)\mu_p q}{\sigma_0}$$
$$= 1 + \frac{\beta\tau_n\alpha I(1+b)\mu_p q}{\sigma_0 b}$$

于是得量子产额

$$\beta = \frac{(\gamma-1)b\sigma_0}{I\alpha\tau_n\mu_p q(1+b)} = 5.11 \times 10^{21}$$

**【例 10-13】** 将一 n 型锗切成厚度为 $2\alpha$ 的大簿片，样品的长和宽足够大，使得边界效应可以忽略，从而使样品中光生载流子的输运基本是一维的，上下表面的复合速度都为 $s$，然后将一束一定波长并足以穿透样品而没有显著吸收，但仍与本征吸收限接近，足以激发出可检测的电子—空穴对浓度。求稳定状态时样品中各点的光生载流子浓度。

**解：** 选 $x$ 轴垂直于样品的表面，原点取在样品的中心，于是两表面位于 $x=\pm\alpha$ 处。由于在 $y$,$z$ 方向没有光生载流子浓度的变化，电场也近于没有 $x$ 分量，所以在稳定情况下非平衡载流子的连续性方程为

$$\frac{\mathrm{d}^2\Delta p}{\mathrm{d}x^2}-\frac{\Delta p}{L_\mathrm{p}^2}=-\frac{g}{D_\mathrm{p}}$$

式中 $D_\mathrm{p}$ 为空穴扩散系数，而且

$$L_\mathrm{p}=(D_\mathrm{p}\tau)^{\frac{1}{2}}$$

为其扩散长度。

上式的解为

$$\Delta p=A\mathrm{ch}\frac{x}{L_\mathrm{p}}+B\mathrm{sh}\frac{x}{L_\mathrm{p}}+g\tau$$

式中 $A$、$B$ 为常数。由于问题的对称性，$\Delta p$ 必须是 $x$ 的偶函数，因此 $B=0$。另外在 $x=\pm\alpha$ 处必须满足

$$\mp D_\mathrm{p}\left(\frac{\mathrm{d}\Delta p}{\mathrm{d}x}\right)_{\mp\alpha}=s\Delta p(\pm\alpha)$$

由此得

$$A=\frac{-s\tau g}{s\mathrm{ch}\dfrac{\alpha}{L_\mathrm{p}}+\dfrac{D_\mathrm{p}}{L_\mathrm{p}}\mathrm{sh}\dfrac{\alpha}{L_\mathrm{p}}}$$

于是得到光生空穴浓度在 $x$ 方向分布为

$$\Delta p=g\tau\left[1-\frac{s\mathrm{ch}\dfrac{x}{L_\mathrm{p}}}{s\mathrm{ch}\dfrac{\alpha}{L_\mathrm{p}}+\dfrac{D_\mathrm{p}}{L_\mathrm{p}}\mathrm{sh}\dfrac{\alpha}{L_\mathrm{p}}}\right]$$

**【例 10-14】** 如图 10-10 所示为一柱透镜汇聚的光照射在一条状半导体 pn 结上，已知在室温下 n 区电阻率为 40 Ω·cm，p 区电阻率为 0.1 Ω·cm，反向饱和电流为 1 μA，电子迁移率为 3600 $\mathrm{cm^2/(V\cdot s)}$，空穴迁移率为 1800 $\mathrm{cm^2/(V\cdot s)}$，n 区的电子深度为 $3\times10^{13}\mathrm{cm^{-3}}$，试回答下列问题：

(1) 当光照射 pn 结时($x=B$ 点)，短路光电流为 1 mA，求与此相应的开路光电压为多少？

(2) 当光照射 $A$ 的时候，$\left(OA=\frac{1}{2}OB\right)$，照射部分的电阻率下降到 20 Ω·cm，问需要多少勒克斯(lx)的光照射？已知 n 区半导体在 100 lx 光照下生成 $10^{13}/\mathrm{cm^3}$ 电子—空穴对，并且生成的电子 -空穴对数与光照度成正比。(3) 当光照射位置由 $x=O$ 到 $x=C$ 缓慢移动的情况下，图示为开路光电压的变化情况。假设电子及空穴的扩散长度 $L_\mathrm{n}$，及 $L_\mathrm{p}$ 相等。

**解：**

(1) pn 结开路光电压为

$$V_{oc}=\frac{k_0T}{q}\ln\left(\frac{I_{sc}}{I_s}+1\right)=0.179(\text{V})$$

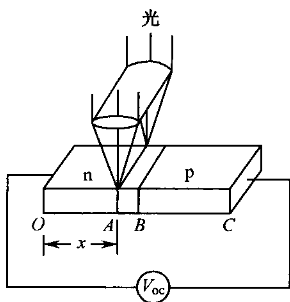



图 10 10

(2) 在光照下半导体内生成 $\Delta n$ 个电子—空穴对，相应电导率的改变为

$$\Delta\sigma=q\Delta n(\mu_n+\mu_p)$$

所以

$$\Delta n=\frac{\Delta\sigma}{q(\mu_n+\mu_p)}=0.231\times10^{19}(1/\text{cm}^3)$$

由给定条件在 100 lx 光照下生成

$$\Delta n'=10^{13}(1/\text{cm}^3)$$

的电子—空穴对，并且生成的电子—空穴对数与光照度成正比，因而所求的光照度为

$$R=100\frac{\Delta\sigma}{\Delta\sigma'}=100\frac{\Delta n}{\Delta n'}=23.1(\text{lx})$$

(3) 根据开路光电压

$$V_{oc}=\frac{k_0T}{q}\ln\left(\frac{I_{sc}}{I_s}+1\right)$$

及太阳电池的短路电流 $I_{sc}$等于光电流 $I_L$，所以上式可写成

$$V_{oc}=\frac{k_0T}{q}\ln\left(\frac{I_L}{I_s}+1\right)$$

在一般情况下 $I_s\ll I_L$，所以

$$V_{oc}=\frac{k_0T}{q}\ln\frac{I_L}{I_s}$$

此外，光电流在 n 型区与 $\exp[(x-OB)/L_n]$成正比，在 p 型区与 $\exp[(BC-x)/L_p]$成正比。由于 $L_n=L_p$，因而开路电压随 $x$ 的变化如图 10-11 所示。

**【例 10-15】** 设一入射光子通量为 $F_{ph}$的单色光照射在“$p^+$在 n 上”的 $p^+n$ 光电池的表面，表面反射和表面复合不予考虑。设吸收系数为 $\alpha$，背面接触处的表面复合速度为 $S$，设在 $p^+$ 层内的吸收忽略不计。推导 n 侧内光产生少数载流了密度和电流的表示式(如图 10-12所示)。

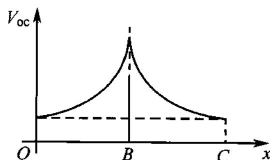



图 10-11

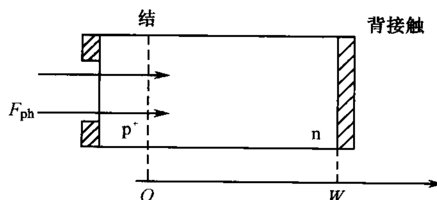



图 10-12　例 10-15 用图

**解**：光在 n 区的吸收系数为 $\alpha$，所以电子—空穴对的产生率是透入深度的函数即：

$$g_L = \alpha F_{ph} e^{-\alpha x}$$

n 侧少数载流子的稳态连续性方程为

$$\left(D_p \frac{d^2 P_n}{dx^2}\right) - \frac{p_n - p_{n0}}{\tau_p} + \alpha F_{ph} e^{-\alpha x} = 0 \tag{1}$$

其边界条件：在 $x = 0$ 处有 $\quad p_n - p_{n0} = 0$

在 $x = W$ 处有 $\quad S(p_n - p_{n0}) = -D_p \frac{dp_n}{dx}$

式(1)的通解为 $\quad p_n - p_{n0} = Ae^{\frac{x}{L_p}} + Be^{-\frac{x}{L_p}} - \frac{\alpha F_{ph}\tau_p}{\alpha^2 L_p^2 - 1} e^{-\alpha x} \qquad (2)$

代入边界条件得

$$A + B - \frac{\alpha F_{ph}\tau_p}{\alpha^2 L_p^2 - 1} = 0$$

$$-\frac{D_p}{L_p} Ae^{\frac{W}{L_p}} + \frac{D_p}{L_p} Be^{-\frac{W}{L_p}} + \frac{\alpha^2 F_{pn}\tau_p D_p}{\alpha^2 L_p^2 - 1} e^{-\alpha W} = S(p_n - p_{n0})$$

解出 $A, B$ 后代入式(2)得

$$p_n - p_{n0} = \frac{\alpha F_{ph}\tau_p}{\alpha^2 L_p^2 - 1}\left[\operatorname{ch}\frac{x}{L_p} - e^{-\alpha x} - \frac{S\left(\operatorname{ch}\frac{W}{L_p}\right) + \frac{D_p}{L_p}\left(\operatorname{sh}\frac{W}{L_p}\right) + (\alpha D_p - S)e^{-\alpha W}}{S\left(\operatorname{sh}\frac{W}{L_p}\right) + \frac{D_p}{L_p}\operatorname{ch}\frac{W}{L_p}} \operatorname{sh}\frac{x}{L_p}\right]$$

从 $n$ 区流到 $p^+$ 区的空穴电流为：$J_p = -qD_p \left.\frac{dp_n}{dx}\right|_{x=0}$

$$J_p = \frac{qF_{ph}\alpha L_p}{\alpha^2 L_p^2 - 1}\left[\frac{S\left(\operatorname{ch}\frac{W}{L_p}\right) + \frac{D_p}{L_p}\left(\operatorname{sh}\frac{W}{L_p}\right) + (\alpha D_p - S)e^{-\alpha W}}{S\left(\operatorname{sh}\frac{W}{L_p}\right) + \frac{D_p}{L_p}\operatorname{ch}\frac{W}{L_p}} - \alpha L_p\right]$$

**【例 10-16】** 用光子流强为 $P_0$、光子能量为 $h\nu$ 的光照射一个由金属和 n 型半导体构成的肖特基光电二极管。已知 $E_g > h\nu > q\phi_B$（$\phi_B$ 为接触电势差），则在金属层内产生的光生电子，有部分向半导体内发射。如金属中的光吸收系数为 $\alpha$，金属膜的厚度为 $l$，则离光照的金属表面 $x$ 处的光生电子逸入半导体的几率为 $e^{-b(l-x)}$。金属中光生电子的量子产额为 $\beta$。试证：(1) 光电二极管的量子效率 $\eta$（进入半导体的光电子数与入射的光子数 $P_0$ 之比）为

$$\eta = \beta \frac{\alpha}{b - \alpha}(e^{-\alpha l} - e^{-bl})$$

(2) 当 $l - l_0 = \frac{\ln(b/\alpha)}{b - \alpha}$ 时，$\eta$ 达到最大值 $\eta_m$，且 $\eta_m = \beta\left(\frac{\alpha}{b}\right)^{b/(b-d)}$。

**证明**：(1) 金属中 $x$ 处单位时间、单位体积产生的电子数为

$$Q = \beta P\alpha = \beta\alpha P_{o} \mathrm{e}^{-\alpha x}$$

在 $x \sim x + \mathrm{d}x$ 处单位面积、单位时间进入半导体的电子数为

$$\alpha\beta P_{o} \mathrm{e}^{\ \alpha x} \mathrm{e}^{\ b(l-x)} \mathrm{d}x$$

从 0～$l$ 范围内进入半导体的总数除以 $P_{o}$ 即得 $\eta$

$$\begin{aligned}\eta &= \frac{1}{P_{o}}\int_{0}^{l} \alpha\beta P_{o} \mathrm{e}^{-\alpha} \mathrm{e}^{-b(l-\alpha)} \mathrm{d}x \\ &= \frac{\beta\alpha}{b-\alpha}(\mathrm{e}^{-\alpha l} - \mathrm{e}^{\ b(l\quad\alpha)})\end{aligned} \tag{1}$$

命题(1)得证。

(2) 将上式对 $\eta$ 求导，并令 $\frac{\mathrm{d}\eta}{\mathrm{d}l} = 0$，即(最大值 $l_{o}$ 满足的方程)

$$\frac{\beta\alpha}{b-\alpha}(-\alpha \mathrm{e}^{-\alpha l_{o}} + b\mathrm{e}^{\ b l_{o}}) = 0$$

解之得

$$l_{o} = \frac{1}{b-\alpha}\ln\frac{b}{\alpha} \tag{2}$$

将式(2) $l = l_{o}$ 代入式(1)得最大效率 $\eta_{m}$ 为

$$\begin{aligned}\eta_{m} &= \frac{\beta\alpha}{b-\alpha}\left[\exp\left(-\alpha\frac{\ln\frac{b}{\alpha}}{b-\alpha}\right) - \exp\left(-b\frac{\ln\frac{b}{\alpha}}{b-\alpha}\right)\right] \\ &= \frac{\beta\alpha}{b-\alpha}\left[\left(\frac{b}{\alpha}\right)^{-\frac{\alpha}{b-\alpha}} - \left(\frac{b}{\alpha}\right)^{-\frac{b}{b-\alpha}}\right] \\ &= \frac{\beta-\alpha}{b-\alpha}\left[\left(\frac{\alpha}{b}\right)^{\alpha/(b-\alpha)} - \left(\frac{\alpha}{b}\right)^{b/(b-\alpha)}\right] \\ &= \frac{\beta\alpha}{b-\alpha}\left(\frac{\alpha}{b}\right)^{b/(b-\alpha)}\left[\left(\frac{\alpha}{b}\right)^{\frac{\alpha-b}{b-\alpha}} - 1\right] \\ &= \frac{\beta\alpha}{b-\alpha}\left(\frac{\alpha}{b}\right)^{b/(b-\alpha)}\left(\frac{b}{\alpha} - 1\right) \\ &= \beta\left(\left(\frac{\alpha}{b}\right)^{\alpha/(b-\alpha)}\right.\end{aligned}$$

即命题(2)得证。注意，此题是假设了光在金属中透射的平均深度 $\frac{1}{\alpha}$ 大于金属膜的厚度 $l$ 才成立。否则要考虑光子被半导体吸收，光生少子渡过势垒的贡献。

**【例 10-17】** 如图 10-13 所示，设 $V_{mp}$ 和 $I_{mp}$ 分别为 pn 结太阳能电池最大输出功率时

的电压和电流，$I_L$ 为电池的光生电流，$I_S$ 为 pn 结的反向饱和电流，$A$ 为电池的曝光面积，$P_{in}/\text{cm}^2$ 为单位面积上的光功率，$\beta\equiv\frac{q}{k_0T}$。试证太阳能电池的转换效率 $\eta$ 为

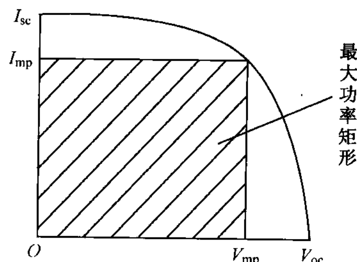


图 10-13　例 10-17 用图

$$\eta=\frac{I_L\beta V_{mp}^2\left(\frac{I_S}{I_L}+1\right)}{(1+\beta V_{mp})A}\cdot\frac{1}{P_{in}/\text{cm}^2}$$

**证 明：** 由定义知道 $\eta\equiv\frac{\text{最大功率输出}}{\text{功率输入}}=\frac{I_{mp}V_{mp}/\text{cm}^2}{P_{in}/\text{cm}^2}$，先求 $I_{mp}$，$V_{mp}$。

任意负载下的输出功率为

$$P=IV=I_SV(e^{\frac{qV}{k_0T}}-1)-I_LV$$

由 $\frac{dP}{dV}=0$，可得最大功率输出的条件为

$$\frac{dP}{dV}=I_Se^{\frac{qV_{mp}}{k_0T}}-I_S+I_SV_{mp}e^{\frac{qV_{mp}}{k_0T}}\ \frac{q}{k_0T}-I_L=0$$

$$(1+\beta V_{mp})e^{\beta V_{mp}}=1+\frac{I_L}{I_S}\tag{1}$$

式中 $\beta=\frac{q}{k_0T}$，令

$$\begin{aligned}I_{mp}&=[I_S(e^{\beta V_{mp}}-1)-I_L]\\&=I_L+I_S-I_Se^{\beta V_{mp}}\end{aligned}\tag{2}$$

由式(1)得

$$I_L+I_S-I_S\exp(\beta V_{mp})=\beta I_SV_{mp}\exp(\beta V_{mp})\tag{3}$$

由式(2)、式(3)得

$$I_{mp}=I_S\beta V_{mp}\exp(\beta V_{mp})$$

故

$$\eta=\frac{I_S\beta V_{mp}^2\exp(\beta V_{mp})/\text{cm}^2}{P_{in}/\text{cm}^2}\tag{4}$$

由式(1)得

$$\exp(\beta V_{mp})=\frac{1+\frac{I_L}{I_S}}{1+\beta V_{mp}}$$

将上式代入式(4)

$$\eta=\frac{I_S\beta V_{mp}^2\left(1+\frac{I_L}{I_S}\right)}{(1+\beta V_{mp})A}\ \frac{1}{P_{in}/\text{cm}^2}=\frac{I_L\beta V_{mp}^2(\frac{I_S}{I_L}+1)}{(1+\beta V_{mp})}\ \frac{1}{P_{in}/\text{cm}^2}$$

即得证。

【例 10-18】 现有一块掺杂浓度 $N_D=10^{16}/cm^2$ 的 n-Ge 的样品，其厚度 $d \gg L_p$，在样品上表面用波长 $\lambda = 0.75\ \mu m$，其强度 $p = 4.4 \times 10^{-3}\ W/cm^2$ 的红光垂直照射，除反射之外，其余全部在表面薄层 $\Delta d = 0.1\ \mu m$ 的厚度之内被均匀吸收，产生非平衡载流子 $\Delta p = \Delta n$ 为小注入。设其量子产额 $\beta = 1$，表面对这种光的反射系数 $R=40\%$，光生载流子的寿命 $\tau = 1.82 \times 10^{-3}$ s，电子迁移率 $\mu_n = 2800\ cm^2/(V \cdot s)$，空穴迁移率 $\mu_p = 700\ cm^2/(V \cdot s)$，普朗克常数 $h = 6.6 \times 10^{-34}$ J·s，光速 $C = 3 \times 10^{10}$ cm/s(如图 10-14 所示)。

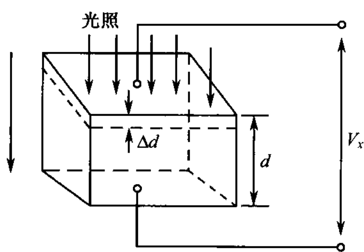


图 10-14 例 10-18 用图

试求：室温(300K)下样品光照面和底面之间的开路电压 $V_x$。

**解：** 以光子数计算进入半导体的光强度为

$$I=\frac{P(1-R)}{h\nu}=\frac{4.4\times10^{-3}\times0.6}{6.6\times10^{-34}\times\frac{c}{\lambda}}$$

$$=\frac{4.4\times10^{-3}\times0.6}{6.6\times10^{-34}\times\frac{3\times10^{10}}{0.75\times10^{-4}}}=10^{16}[1/(cm^2\cdot s)]$$

单位时间在单位面积上产生的电子—空穴对数：$Q = I\beta = 10^{16}/\ cm^2 \cdot s$。

若忽略 $\Delta d$ 内复合的载流子数目不计，则单位时间在单位面积上产生的非平衡空穴全部沿 $x$ 方向扩散，因此

$$-D_p\frac{d\Delta p(x)}{dx}\bigg|_{x-0}=Q$$

因为 $d \ll L_p$，所以 $\Delta p(x) = \Delta p_0 e^{-\frac{x}{L_p}}$，代入上式后得

$$\frac{D_p}{L_p}\Delta p_0 = Q$$

式中，$L_p=\sqrt{D_p\tau_p}$，故

$$\Delta p_0=\frac{L_p}{D_p}Q=\sqrt{\frac{\tau_p}{D_p}}Q$$

根据爱因斯坦关系

$$D_p=\frac{k_0T}{q}\mu_p=0.026\times700=18.2(cm^2/s)$$

$$\Delta p_0=\sqrt{\frac{1.82\times10^{-3}}{18.2}}\times10^{16}=10^{14}(1/cm^3)$$

达到稳定后，由于电子和空穴扩散系数不同，在各处形成的电场所引起的漂移电流恰好与扩散电流相抵消，即

$$J_x=(nq\mu_n+pq\mu_p)\varepsilon_x+q(D_n-D_p)\frac{d\Delta p}{dx}=0$$

$$\varepsilon_x = -\frac{D_n - D_p}{n\mu_n + p\mu_p}\frac{d\Delta p}{dx} = -\frac{hT}{q}\frac{\mu_n - \mu_p}{n\mu_n + p\mu_p}\frac{d\Delta p}{dx}$$

对于 n 型半导体，$n_0 \gg p_0$ 且为小注入情况，所以

$$\varepsilon_x = -\frac{k_0 T}{q}\frac{\mu_n - \mu_p}{n_0\mu_n L_p}\frac{d\Delta p}{dx}$$

$$= \frac{k_0 T}{q}\frac{\mu_n - \mu_p}{n_0\mu_n L_p}(\Delta p_0)e^{-\frac{x}{L_p}}$$

因而沿光照方向产生电势差

$$V_x = \int_0^d \varepsilon_x dx = -\frac{k_0 T}{q}\frac{\mu_n - \mu_p}{n_0\mu_n}\int_0^d \frac{d\Delta p}{dx}dx$$

$$= \frac{k_0 T}{q}\frac{\mu_n - \mu_p}{n_0\mu_n}[(\Delta p)_0 - (\Delta p)d]$$

因为 $d \gg L_p$，所以 $(\Delta p)d = 0$，故

$$V_x = \frac{k_0 T}{q}\frac{\mu_n - \mu_p}{\mu_n}\frac{(\Delta p)_0}{n_0}$$

代入已知数据：$V_x = 0.026 \times \frac{2800 - 700}{2800} \times \frac{10^{14}}{10^{16}} = 1.95 \times 10^{-4}$ (V)。

# 第 11 章　半导体的热电性质

**主题词**

塞贝克效应、帕尔帖效应、汤姆逊效应，开耳芬关系，温差发电器，半导体制冷器。

## 11.1　理论概要与重点分析

半导体的热电性质是指半导体把热能转换成电能或者相反的温差电现象。实质上是热现象和电现象通过电子动能和费米能级相联系的一种效应。主要有塞贝克效应，帕尔帖效应和汤姆逊效应。

（1）塞贝克或温差电效应

当两种不同的半导体相接成一个闭合回路时，如果两个接头具有温度差 $\Delta T$，则在回路中有电流通过，称为温差电流，产生此电流的电动势称为温差电动势。当回路开路时，两端产生电势差 $\Delta V$，其大小依赖于温差和物质本身的性质。

$$\Delta V = \alpha_{ab}\Delta T \tag{11.1}$$

式中，$\alpha_{ab}$ 为塞贝克系数，即单位温度差时的温差电动势。在温度不同的各点载流子浓度不同，其扩散作用引起电荷分离，导致建立温差电场 $E^{\alpha}$，$E^{\alpha}$ 会阻止电荷的进一步分离。温差电场引起的漂移电流 $j_E = \sigma E^{\alpha}$ 抵消了由载流子浓度梯度引起的扩散电流，$j_D = -qD_n\left(\frac{dn}{dx}\right)$。因此

$$j = j_E + j_D = 0 \tag{11.2}$$

据此可求得 n 型和 p 型半导体的塞贝克系数为：

p 型半导体
$$\alpha_p = \frac{k_0 T}{q}\left(\frac{3}{2} + \xi_p\right) \tag{11.3}$$

n 型半导体
$$\alpha_n = -\frac{k_0 T}{q}\left(\frac{3}{2} + \xi_n\right) \tag{11.4}$$

式中
$$\xi_p = \frac{E_F - E_v}{k_0 T} = -\ln\frac{p}{N_v}$$

$$\xi_n = \frac{E_c - E_F}{k_0 T} = -\ln\frac{n}{N_c}$$

对于两种载流子参与导电的半导体有

$$\alpha = \frac{\alpha_n\sigma_n + \alpha_p\sigma_p}{\sigma_n + \sigma_p} \tag{11.5}$$

（2）帕尔帖效应

当两种不同的半导体或半导体与金属相连接再通以电流时，根据电流方向的不同，在

接头处会有吸热或放热的现象，称为帕尔帖效应。单位时间在单位面积吸收的热量

$$\Delta Q = \pi_{ab} J \tag{11.6}$$

式中，$\pi_{ab}$为帕尔帖系数，为正时表示吸热，为负时则表示放热。对于杂质浓度不同的同一导电类型的两种半导体 A 和 B 有：

p 型半导体
$$\pi_{ab} = \pm \frac{k_0 T}{q} \ln \frac{p_a}{p_b} \tag{11.7}$$

n 型半导体
$$\pi_{ab} = \pm \frac{k_0 T}{q} \ln \frac{n_a}{n_b} \tag{11.8}$$

当电流由 A 流向 B 时，$\pi_{ab}$为正，反之为负。

(3) 汤姆逊效应

当电流通过有温度梯度的半导体时，原有的温度分布将被破坏。为了维持原有的温度分布，还会出现吸热或放热现象(除产生正常的焦耳热外)，这种效应称为汤姆逊效应。若电流从低温向高温方向流动，则单位时间单位体积内所吸收的热量

$$\Delta Q = J_x \sigma^T \frac{\Delta T}{\Delta x} \tag{11.9}$$

$\sigma^T$ 为汤姆逊系数，对 n 型和 p 型半导体分别为：

n 型半导体
$$\sigma_n^T = \frac{1}{q} \frac{dE_F}{dT} + \frac{E_c - E_F}{qT} \tag{11.10}$$

p 型半导体
$$\sigma_p^T = \frac{1}{q} \frac{dE_F}{dT} + \frac{E_v - E_F}{qT} \tag{11.11}$$

(4) 以上三种效应均是有温度梯度存在而出现的，那么三个系数之间必有某种联系，这种联系就是开耳芬关系式：

第一关系式
$$\pi_{ab} = \alpha_{ab} T \tag{11.12}$$

第二关系式
$$\sigma_a^T - \sigma_b^T = -T \frac{d\alpha_{ab}}{dT} \tag{11.13}$$

(5) 利用半导体的热电效应可制成温差发电器，制冷器和发热器。

## 11.2 概念思考与练习题

**【11-1】** 说明热探针测定半导体材料导电类型的原理，你认为这种方法对高阻和低阻材料的可靠性如何？为什么？

**【11-2】** 如何区分温差电动势和温差电动势率。

**【11-3】** 何谓塞贝克效应？用能带论说明 p 型半导体的塞贝克效应。

**【11-4】** 何谓声子引曳效应？试解释低温时温差电动势增大的原因。

**【11-5】** 为什么半导体的温差电效应比金属大得多？

**【11-6】** 定性比较声子和载流子对热导率贡献的机构有何不同？

**【11-7】** 试根据帕耳贴效应画出半导体制冷器的装置示意图，并说明其工作原理。

半导体制冷器可以当加热器用吗？为什么？

**【11-8】** 说明半导体温差发电器的工作原理。

**【11-9】** 制造高效率的半导体温差发电器和制冷器，对半导体材料有何选择。

**【11-10】** 对某一半导体材料，预想提高掺杂浓度从而提高电子浓度达到提高材料的热导率。但实际却得到相反的结果，而提高掺杂浓度时热导率反而下降，试解释出现这种现象的原因。

**【11-11】** 试在图 11-1 上标出用热探针法判断半导体样品导电类型时流过电流计的电流方向。

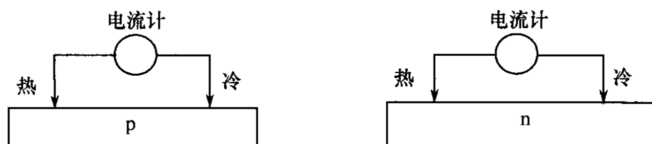



图 11-1　题 11-11 用图

## 11.3　典型例题解析

**【例 11-1】** 以金属与 n 型半导体接触为例说明产生帕尔帖效应的机理。

**解：** 如图 11-2 所示，当金属与 n 型半导体接触达到平衡时，它们的费米能级应该相等。但金属中与半导体中电子的平均动能却不相等. 半导体中参与导电的电子处于 $E-E_c$ 的能量状态，比金属中的电子平均动能高 $\Delta W$。如果有电流从金属流向半导体，这就是半导体中导带电子流向金属，到金属后电子要把多余的能量 $\Delta W$ 释放给金属，即通过与晶格碰撞传给晶格原子而后释放到周围空间，此即放热效应。如果将电流反向，金属中电子流向半导体，为维持热平衡，必须从周围吸收热量。利用这一效应可以制成半导体制冷器。

**【例 11-2】** 定性说明塞贝克效应

图 11-3 表示两种不同导体 a 和 b 构成的开路线路。如果两种导体的接点之间有温度差 $\Delta T$ 时，开路两端产生塞贝克电压 $\Delta V$。

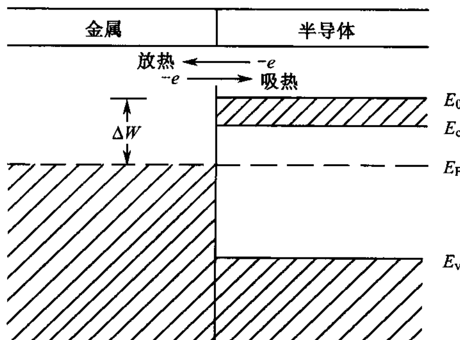



图 11-2　帕尔帖效应机理

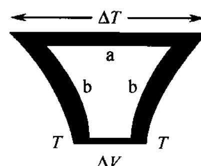



图 11-3　两种不同导体 a 和 b 构成的开路线路

图 11-4 和图 11-5 为塞贝克效应的说明图。在细长的半导体两端用同一种金属形成欧姆接触。它的一端保持一定温度 $T_0$，另一端的温度保持为（$T_0+\Delta T$），半导体内形成均匀的温度梯度。

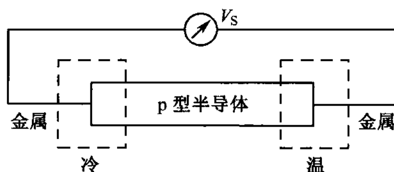



图 11-4　塞贝克效应示意图

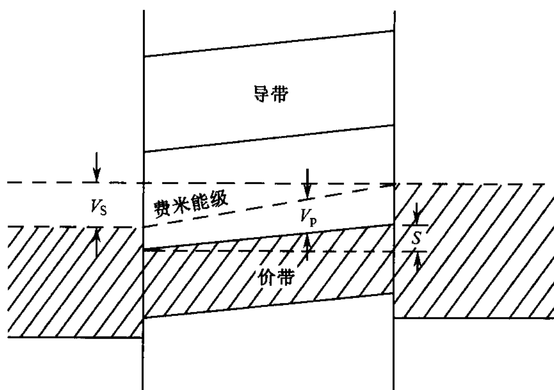



图 11-5　塞贝克效应能带图

假设半导体为 p 型，杂质密度是均匀的，而且在温度 $T_0$ 和（$T_0+\Delta T$）附近，空穴密度随温度的上升按指数函数增加。因此，由于温度梯度，图 11-4 中温度高（右端）的区域空穴密度比温度低的区域（左端）高，空穴从右向左进行扩散，在左端 $T_0$ 侧积累空穴，形成带正电荷的空间电荷区。由于空间电荷区的形成，使半导体中产生指向右方的电场，阻碍空穴的继续扩散。当空间电荷区的电场作用和空穴的扩散效应平衡时达到定态（稳态），其结果如图 11-5所示。定态下半导体的能带倾斜，两端费米能级差作为塞贝克电压被测出。

**【例 11-3】** 在例题 11-1 中，若空穴密度遵循玻尔兹曼统计，试证明 p 型半导体的塞贝克电压 $V_S$ 为

$$V_S=\frac{k}{q}\left(\frac{3}{2}+\xi\right)\cdot\Delta T \tag{1}$$

式中，$\xi=qV_F/kT$。

**解**：如图 11-4 所示，两端能带之差 $S$ 表示由于空穴扩散产生的空间电荷电场而形成的电势差。

半导体中费米能级的位置因温度变化而改变，因此，费米能级的倾斜不一定与能带的倾斜相一致。两端费米能级之差就是塞贝克电压 $V_S$，它由下式给出

$$V_S = S + \frac{dV_F}{dT} \cdot \Delta T \tag{2}$$

假设半导体中的载流子只是空穴时，由高温处向低温处流动的扩散电流密度 $j_{h\to c}$ 为

$$j_{h\to c} = qD_p \frac{dp}{dx}$$

由于空间电荷电场 $S/L$（$L$ 为半导体的长度）的作用，由低温处向高温处流动的空穴电流密度 $j_{c\to h}$为

$$j_{c\to h} = p \cdot \mu_p \cdot q \frac{S}{L}$$

定态时，两者的电流密度相等，即

$$q \cdot D_p \frac{dp}{dx} = p \cdot \mu_p \cdot q \cdot \frac{S}{L}$$

利用爱因斯坦关系式

$$D_p = \frac{k_0 T}{q} \mu_p$$

可得

$$\frac{dp}{dx} = \frac{q}{kT} \cdot p \cdot \frac{S}{L}$$

另外，由于

$$\frac{dp}{dx} = \frac{dp}{dT}, \qquad \frac{dT}{dx} = \frac{dp}{dT} \cdot \frac{\Delta T}{L}$$

故

$$\frac{dp}{dT} = \frac{q}{kT} \cdot p \cdot \frac{S}{\Delta T} \tag{3}$$

由于空穴密度分布遵循玻尔兹曼统计，则有

$$p = U_v T^{3/2} \exp\left(-\frac{eV_F}{kT}\right)$$

$$(N_v = U_v T^{3/2}, \quad E_F = qV_F)$$

对温度 $T$ 微分得

$$\begin{aligned}
\frac{dp}{dT} &= \frac{3}{2} U_v T^{1/2} \exp\left(-\frac{qV_F}{kT}\right) + \left(\frac{qV_F}{kT} - \frac{q}{kT} \cdot \frac{dV_F}{kT}\right) U_v T^{3/2} \exp\left(-\frac{qV_F}{kT}\right) \\
&= \frac{1}{T} U_v T^{3/2} \exp\left(-\frac{dV_F}{kT}\right)\left(\frac{3}{2} + \frac{qV_F}{kT} - \frac{q}{k} \cdot \frac{dV_F}{dT}\right) \\
&= \frac{1}{T} p \left(\frac{3}{2} + \xi - \frac{q}{k} \frac{dV_F}{dT}\right)
\end{aligned} \tag{4}$$

将上式代入式(3)得

$$\frac{p}{T}\left(\frac{3}{2} + \xi - \frac{q}{k} \frac{dV_F}{dT}\right) = \frac{q}{kT} p \frac{S}{\Delta T}$$

$$S = \frac{k}{q}\left(\frac{3}{2} + \xi\right)\Delta T - \frac{dV_F}{dT} \Delta T \tag{5}$$

将式(5)代入式(2)中得

$$V_S = S + \frac{dV_F}{dT}\Delta T$$

$$= \frac{k}{q}\left(\frac{3}{2} + \xi\right)\Delta T$$

这里

$$\frac{V_S}{\Delta T} = \frac{k}{q}\left(\frac{3}{2} + \xi\right) \equiv \alpha$$

称为塞贝克系数。

**注意：**在这个例题中，导出塞贝克电压时，在所考虑的温度范围内，假定了载流子密度的温度关系为

$$p = N_v \exp\left(-\frac{E_F}{kT}\right) \qquad \text{（玻尔兹曼分布）}$$

但是，载流子密度与温度无关时（比如，半导体的饱和电离区或者金属等）也能产生微弱的塞贝克电压（这就是金属中塞贝克系数小的根本原因），这是因为温度高的一侧热能大，所以通过样品断面的从高温处向低温处流动的载流子比反向的多，因而破坏了平衡的缘故。

另外，在半导体中运动的载流子的动能 $\varepsilon$ 与载流子散射的弛豫时间 $\tau$ 有关，一般有如下关系

$$\tau \propto \varepsilon^{\gamma}$$

这里 $\gamma$ 是由载流子散射机构决定的常数，表 11-1 给出几个典型的 $\gamma$ 值。考虑这种散射效应时，式(1)中的 3/2 应修正为$(5/2+\gamma)$，因此，塞贝克系数的修正值为

$$\alpha = \frac{k}{q}\left[\left(\frac{5}{2} + \gamma\right) + \xi\right]$$

**表 11-1　几个典型的 $\gamma$ 值**

| 散　射　机　构 | $\gamma$ |
| --- | --- |
| 晶格散射 | $-\frac{1}{2}$ |
| 离子散射( $kT \ll h\nu_0$ ) | 0 |
| 离子散射( $kT \ll h\nu_0$ ) | $\frac{1}{2}$ |
| 杂质散射 | $\frac{3}{2}$ |

注：$\nu_0$ 为离子固有振动频率。

**【例 11-4】**　说明汤姆逊效应，并证明汤姆逊系数 $\sigma^T$ 为

$$\sigma^T = \frac{3}{2} \times \frac{k}{q} - \frac{S}{\Delta T} \qquad (1)$$

式中，$S$ 为例题 11-2 中使用过的两端能带之差。

**解：**如图 11-6 所示，在不同地方具有不同温度的一种半导体中通过电流时，在半导体内，单位时间内放出或吸收焦耳热以外的热量 $\Delta Q$，这种效应称为汤姆逊效应。汤姆逊

系数 $\sigma^{\mathrm{T}}$ 为

$$\sigma^{\mathrm{T}} = -\frac{\Delta Q}{\Delta T I}$$

式中，$I$ 为电流。

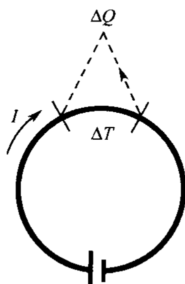


图 11 6　例 11-4 用图

根据图 11-4 来说明这个效应。如图所示，在温度梯度均匀的 p 型半导体中，如果空穴从左向右运动，空穴通过半导体全长 $L$ 期间失去 $qS$ 的能量，与此同时获得平均动能 $(3/2)k\ \Delta T$，两者的代数和为

$$-qS + \frac{3}{2}k\ \Delta T$$

这就是空穴运动而得的净能量。根据两者的大小，这个能量可能为正值，也可能为负值。但上式的能量总是被半导体晶格夺取或者放出，从而吸热或放热。

汤姆逊系数即用电流强度去除单位时间放出或吸收的热量的比值。这里定义电流方向与温度梯度方向一致时，载流子平均总能量增加(样品冷却)的汤姆逊系数为正，反之为负。

汤姆逊系数，可由上式直接求得，即

$$\sigma^{\mathrm{T}} = \frac{\left(-S + \frac{3}{2} \times \frac{k}{q} \Delta T\right)}{\Delta T}$$

$$= \frac{3}{2} \times \frac{k}{q} - \frac{S}{\Delta T} \tag{2}$$

**【例 11-5】** 作为载流子，同时存在空穴和电子时，试证明塞贝克电压 $V_{\mathrm{S}}$ 为

$$V_{\mathrm{S}} = \frac{k\left[p\,\mu_{\mathrm{p}}\left(\frac{3}{2} + \xi_{\mathrm{p}}\right) - n\mu_{\mathrm{n}}\left(\frac{3}{2} + \xi_{\mathrm{n}}\right)\right]}{q(p\,\mu_{\mathrm{p}} + n\mu_{\mathrm{n}})}\Delta T$$

$$= \frac{\sigma_{\mathrm{p}}\,\alpha_{\mathrm{p}} + \sigma_{\mathrm{n}}\,\alpha_{\mathrm{n}}}{\sigma} \tag{1}$$

其中

$$\xi_{\mathrm{p}} = \frac{q}{kT}(V_{\mathrm{g}} - V_{\mathrm{f}})$$

$\sigma_{\mathrm{p}}$，$\sigma_{\mathrm{n}}$，$\alpha_{\mathrm{p}}$ 和 $\alpha_{\mathrm{n}}$ 分别为空穴和电子的电导率及塞贝克系数，而且，$\sigma = \sigma_{\mathrm{p}} + \sigma_{\mathrm{n}}$，$V_{\mathrm{g}} = E_{\mathrm{g}}/q$。

**解：** 按照例题 11-3 的方法，分别对电子和空穴进行计算。

扩散电流密度为

$$j_{\mathrm{h}\to\mathrm{c}} = qD_{\mathrm{p}}\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}x} - qD_{\mathrm{n}}\frac{\mathrm{d}n}{\mathrm{d}x}$$

漂移电流密度为

$$j_{\mathrm{c}\to\mathrm{h}} = qp\mu_{\mathrm{p}}\frac{S}{L} + qn\,\mu_{\mathrm{n}}\frac{S}{L}$$

稳定时

$$j_{h\to c}=j_{c\to h}$$

故

$$D_p\frac{dp}{dx}-D_n\frac{dn}{dx}=(p\,\mu_p+n\,\mu_n)\,\frac{S}{L}$$

将 Einstein 关系式

$$D_p=\frac{kT}{q}\mu_p,\quad D_n=\frac{kT}{q}\mu_n$$

代入上式中，得

$$\mu_p\frac{dp}{dx}-\mu_n\frac{dn}{dx}=\frac{q}{kT}(p\,\mu_p+n\,\mu_n)\,\frac{S}{L}$$

$$\mu_p\frac{dp}{dx}-\mu_n\frac{dn}{dT}=\frac{q}{kT}(p\,\mu_p+n\,\mu_n)\,\frac{S}{\Delta T}\tag{2}$$

另外，利用 $E_g=q\,V_q$ 关系，得

$$n=U_c\,T^{3/2}\exp\left[-\frac{q}{kT}(V_g-V_F)\right]$$

$$\frac{dn}{dT}=\frac{3}{2}U_c\,T^{1/2}\exp\left[-\frac{q}{kT}(V_g-V_F)\right]+$$

$$U_c\,T^{3/2}\left[\frac{q\,\frac{dV_F}{dT}\,T+q(V_g-V_F)}{kT^2}\right]\exp\left[-\frac{q}{kT}(V_g-V_F)\right]$$

$$=\frac{n}{T}\left(\frac{3}{2}+\frac{q}{k}\,\frac{dV_F}{dT}+\xi_p\right)\tag{3}$$

其中

$$\xi_p=\frac{q}{kT}(V_g-V_F)$$

又从例 11-3 中式(4)得

$$\frac{dp}{dT}=\frac{p}{T}\left(\frac{3}{2}+\xi-\frac{q}{k}\,\frac{dV_F}{dT}\right)$$

将式(3)和例 11-3 中式(4)代入本题中式(2)中，得

$$\mu_p\frac{p}{T}\left(\frac{3}{2}+\xi-\frac{q}{k}\,\frac{dV_j}{dT}\right)-\mu_n\frac{n}{T}\left(\frac{3}{2}+\frac{q}{k}\,\frac{dV_F}{dT}+\xi_p\right)$$

$$=\frac{q}{kT}(p\,\mu_p+n\,\mu_n)\,\frac{S}{\Delta T}$$

求 $S$ 得

$$S=\frac{k\,\Delta T}{q(p\mu_p+n\mu_n)}\left[\mu_p\,p\left(\frac{3}{2}+\xi\right)-\mu_n\,n\left(\frac{3}{2}+\xi_p\right)\right]-\frac{dV_F}{dT}\,\Delta T$$

故

$$V_S=S+\frac{dV_F}{dT}\,\Delta T$$

$$= \frac{k\left[p\,\mu_{\mathrm{p}}\left(\frac{3}{2}+\xi\right)-n\mu_{\mathrm{n}}\left(\frac{3}{2}+\xi_{\mathrm{p}}\right)\right]}{q(p\,\mu_{\mathrm{p}}+n\mu_{\mathrm{n}})}\,\Delta T$$

$$= \frac{\sigma_{\mathrm{p}}\,\alpha_{\mathrm{p}}+\sigma_{\mathrm{n}}\,\alpha_{\mathrm{n}}}{\sigma}\,\Delta T \tag{4}$$

式中

$$\left.\begin{aligned}
\sigma &= q(p\,\mu_{\mathrm{p}}+n\mu_{\mathrm{n}})\\
\sigma_{\mathrm{p}} &= q\,p\,\mu_{\mathrm{p}}\\
\sigma_{\mathrm{n}} &= q\,n\,\mu_{\mathrm{n}}\\
\alpha_{\mathrm{p}} &= \frac{k}{q}\left(\frac{3}{2}+\xi\right)\\
\alpha_{\mathrm{n}} &= -\frac{k}{q}\left(\frac{3}{2}+\xi_{\mathrm{p}}\right)
\end{aligned}\right\} \tag{5}$$

**【例 11-6】** 空穴浓度为 $10^{16}\,\mathrm{cm}^{-3}$ 的 p 型硅，冷端温度为 0℃，热端温度为 50℃，设其为长声学波散射，试求温差电动势。

**解：** p 型半导体的温度电动势率由下式给出

$$\alpha_{\mathrm{p}} = \frac{k_0}{q}\left[\left(\frac{5}{2}+\gamma\right)+\xi_{\mathrm{p}}\right]$$

对声学波散射有

$$\gamma = -\frac{1}{2}$$

$$\xi_{\mathrm{p}} = \frac{E_{\mathrm{F}}-E_{\mathrm{v}}}{k_0 T} = -\ln\frac{p}{N_{\mathrm{v}}}$$

所以

$$\alpha_{\mathrm{p}} = \frac{k_0}{q}\left[\left(\frac{5}{2}-\frac{1}{2}\right)-\ln\frac{p}{N_{\mathrm{v}}}\right]$$

$$= \frac{k_0}{q}\left[2-\ln\frac{q}{N_{\mathrm{v}}}\right]$$

故温差电动势

$$\Theta = \alpha_{\mathrm{p}}\Delta T = \frac{k_0}{q}\left(2-\ln\frac{p}{N_{\mathrm{v}}}\right)\Delta T$$

室温下，硅的 $N_{\mathrm{v}} = 1.04\times10^{19}\ (1/\mathrm{cm}^3)$。

因为空穴由热端向冷端扩散，所以用冷端价带状态密度。

故

$$N_{\mathrm{v}'} = N_{\mathrm{v}}\left(\frac{273}{300}\right)^{\frac{3}{2}} = 9.03\times10^{18}\ (1/\mathrm{cm}^3)$$

$$\Theta = \frac{k_0}{q}\left(2-\ln\frac{p}{N_{\mathrm{v}}}\right)\Delta T$$

$$= \frac{k_0}{q}\left(2-\ln\frac{10^{16}}{9.03\times10^{18}}\right)\times 50$$

$$= 0.038(\mathrm{V}) = 3.8(\mathrm{mV})$$

**讨论：** 关于温差电动势 $\Theta$ 的计算公式是在 $\Delta T$ 很小时推得的。

因为 $\Delta T$ 很小，可认为 $T_0$ 和 $(T_0+\Delta T)$ 处的空穴浓度不变。

然而，在 $\Delta T$ 很大时，$\Theta$应由下式表示

$$\Theta=\frac{k_0}{q}\int_{T_1}^{T_2}\left(2-\ln\frac{p}{N_v}\right)\mathrm{d}T$$

上面的解法带有近似性。因此，$N_v$ 用室温的值进行计算也行。

**【例 11-7】** 空穴浓度为 $10^{16}\mathrm{cm}^{-3}$的 p 型锗，室温下与金属连接，通以 $A$ 的电流。求接头处吸收或放出的帕尔帖热(设为长声学波散射)。

**解：** 金属与 p 型半导体连接，通电流时帕尔帖系数为

$$\pi_{ab}=\frac{k_0T}{q}\left[\left(\frac{5}{2}+\gamma\right)+\xi_p\right]$$

$$\xi_p=\frac{E_F-E_v}{k_0T}=-\ln\frac{p}{N_v}$$

对长声学波散射

$$\gamma=-\frac{1}{2}$$

故

$$\pi_{ab}=\frac{k_0T}{q}\left[\left(\frac{5}{2}-\frac{1}{2}\right)-\ln\frac{p}{N_v}\right]$$

$$\pi_{ab}=\frac{k_0T}{q}\left[2-\ln\frac{10^{16}}{6\times10^{18}}\right]$$

$$=0.22(\mathrm{V})$$

故

$$\frac{\mathrm{d}Q}{\mathrm{d}T}-I\pi_{ab}=1\times0.22=0.22(\mathrm{W})$$

**【例 11-8】** 电导率为 2000 S/cm 的 n 型 PoTe，其电子迁移率为 6000 $\mathrm{cm^2/(V\cdot s)}$，电子有效质量为 $0.2\,m_0$，设为长声学波散射，求室温时温差电动势率和帕尔帖系数。

**解：** 温差电动势率 $\alpha_n=-\frac{k_0}{q}\left[\left(\frac{5}{2}+\gamma\right)+\xi_n\right]$

对于长声学波散射有 $\gamma=-\frac{1}{2}$

又 $\xi_n=-\ln\frac{n}{N_c}$，故

$$\sigma=nq\mu_n,\qquad n=\frac{\sigma}{q\mu_n}$$

即

$$n=\frac{2000}{1.6\times10^{-19}\times6000}=2.08\times10^{18}(1/\mathrm{cm^3})$$

又

$$N_c=\frac{2(2\pi m_n^*k_0T)^{\frac{3}{2}}}{h^3}$$

当 $T$ 一定时有 $N_c\propto(m_n^*)^{\frac{3}{2}}$

已知：Si 的 $m_n^*=1.08m_0$，$N_c=2.8\times10^{19}\ \mathrm{cm}^{-3}$；故 PoTe 的

$$N_c' = N_c\left(\frac{0.2}{1.08}\right)^{\frac{3}{2}}$$
$$= 2.23 \times 10^{18}/\text{cm}^3$$
$$\alpha_n = -\frac{1.38 \times 10^{-23} \times 0.625 \times 10^{19}}{q} \times \left(2 - \ln\frac{2.08 \times 10^{18}}{2.23 \times 10^{18}}\right)$$
$$= -1.79 \times 10^{-4}(\text{V/K})$$

帕尔帖系数

$$\pi_{ab} = \frac{k_0 T}{q}\left[\left(\frac{5}{2} - \frac{1}{2}\right) - \ln\frac{n}{N_c}\right]$$
$$= 0.026 \times \left[2 - \ln\frac{2.08}{2.23}\right] = 0.0538(\text{V})$$

即
$$\pi_{ab} = 53.8(\text{mV})$$

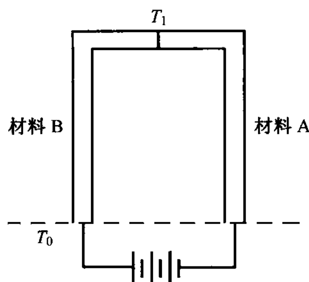


图 11-7 电子冷冻原理

**【例 11-9】** 说明电子冷冻原理。

**解：** 图 11-7 为电子冷冻装置的原理图。两种热电物质 A 和 B 的一端为欧姆接触，另一端加直流电压，在 A 和 B 中通电流 $I$，而且加直流电压的两端保持一定温度 $T_0$。根据帕尔帖效应，从热电物质 A 和 B 接点附近的介质中吸收热量 $Q_c$ 而达到稳态温度 $T_1(T_1 < T_0)$，这就是电子冷冻的原理。

用于此目的的材料最好具备以下几个条件：

(1) 帕尔帖系数 $\pi$，也就是塞贝克系数 $\alpha(\pi = \alpha T)$ 要大；

(2) 热导率 $K$ 要小，免得热接点处的温度容易传到冷接点处；

(3) 为了减少焦耳热的产生，材料的电阻率 $\rho$ 要小。

总的说，热电材料的性能指数为

$$Z = \frac{\alpha^2}{K\rho}$$

此值越大的材料，越有利于作为热电材料。

**【例 11-10】** 碲化铋($Bi_2Te_3$)的热导率为 2.4[W/(m·K)]，求电导率为 $10^5$s/m 的 n 型 $Bi_2Te_3$，300K 时载流子对热导率贡献所占的百分比。(设为长声学波散射)

**解：** 因为

$$\frac{K_c}{\sigma T} = 2\frac{k_0^2}{q^2}$$

所以
$$K_c = 2\sigma T\frac{k_0^2}{q^2}$$
$$= 2 \times 10^5 \times 300 \times \frac{(1.38 \times 10^{-23})^2}{(1.6 \times 10^{-19})^2}$$

$$= 0.45(\mathrm{W/m \cdot K})$$

故
$$\frac{K_c}{K} = \frac{0.45}{0.4} = 0.186 = 18.7\%$$

**【例 11-11】** 为判断锗的导电类型，测得它的霍尔系数为负，而塞贝克系数为正，试判断该样品的导电类型，并说明道理。

**解：** 该样品为 p 型锗。因为两种载流子参加导电的霍尔系数为

$$R_H = \frac{p\mu_p^2 - n\mu_n^2}{q(p\mu_p + n\mu_n)^2}$$

$R_H$ 为负，$p\mu_p^2 < n\mu_n^2$。因为 $\mu_n^2 > \mu_p^2$，所以 $R_H < 0$ 时也可能是 p 型，只由 $R_H < 0$ 不能判断导电类型，两种载流子的塞贝克系数：

$$\alpha_S = \frac{k_0\left[p\mu_p\left(\frac{3}{2} + \xi_p\right) - n\mu_n\left(\frac{3}{2} + \xi_p\right)\right]}{q(p\mu_p + n\mu_n)}$$

本征时 $p = n = n_i, \xi_n = \xi_p = \xi_i$，上式分子变为 $k_0 n_i(1.5 + \xi_i)(\mu_p - \mu_n) < 0$。p 型时 $\xi_p < \xi_n$，故 $\alpha_S > 0$ 时肯定为 p 型，$\alpha_S < 0$ 时可能为 p 型，也可能为 n 型。故该样品必为 p 型 Ge。

**注意：**(1) 霍尔系数为正必定为 p 型，霍尔系数为负则不确定。

(2) 塞贝克系数为正必定为 p 型，塞贝克系数为负则不确定。特别是对于高阻材料，更应注意。

**【例 11-12】** 锗的热电导率为 60W/m·K，求电阻率为 0.01Ω·m 的 n 型锗单晶，300K 时载流子对热电导率的贡献所占的百分比（设长声学波散射）。

**解：**

$$\frac{K_c}{\sigma T} = \left(\frac{5}{2} + \gamma\right)\frac{k_0^2}{q^2}$$

对于长声学波有，$\gamma = -\frac{1}{2}$，所以

$$\frac{K_c}{\sigma T} = 2\frac{k_0^2}{q^2}$$

故载流子的热导率为

$$K_c = 2\sigma T\frac{k_0^2}{q^2}$$

所占百分之比

$$\frac{K_c}{K} = \frac{K_c}{60} = \frac{2}{60}\frac{T}{\rho}\frac{k_0^2}{q^2}$$
$$= \frac{2}{60} \times \frac{300}{0.01} \times \frac{(1.38 \times 10^{-23})^2}{(1.6 \times 10^{-19})^2}$$
$$= 7.4 \times 10^{-6} = 7.4 \times 10^{-4}\%$$

**【例 11-13】** 试求出在室温下本征硅的塞贝克系数。

设电子和空穴的有效质量相等，硅的禁带宽度为 1.12eV，电子和空穴的迁移率分别

为 0.135cm²/(V·s)和 0.048cm²/(V·s)。

**解：** 电子和空穴两种载流子存在的塞贝克系数为

$$\alpha=\frac{k}{q}\frac{p\mu_{\mathrm{p}}\left(\frac{3}{2}+\xi_{\mathrm{p}}\right)-n\mu_{\mathrm{n}}\left(-\frac{3}{2}+\xi_{\mathrm{n}}\right)}{(p\mu_{\mathrm{p}}+n\mu_{\mathrm{n}})}$$

对本征半导体，有 $p=n$。又因为 $m_{\mathrm{n}}^{*}=m_{\mathrm{p}}^{*}$，故 $E_{\mathrm{i}}=\frac{1}{2}E_{\mathrm{g}}$。因此

$$\xi=\frac{E_{\mathrm{g}}}{2k_0T}=\frac{1.12}{2\times 8.63\times 10^{-5}\times 300}=21.6$$

$$\alpha=8.63\times 10^{-5}\times\frac{0.048\left(\frac{3}{2}+21.6\right)-0.135\left(\frac{3}{2}+21.6\right)}{0.135+0.048}$$

$$=-94.8\times 10^{-5}(\mathrm{V/K})=-948(\mu\mathrm{V/K})$$

**【例 11-14】** 试证明半导体温差发电器的转换效率 $\eta$ 为

$$\eta=\frac{\Delta T}{2T_0-\frac{\Delta T}{2}+4\frac{(K_{\mathrm{a}}+K_{\mathrm{b}})(R_{\mathrm{a}}+R_{\mathrm{b}})}{\alpha_{\mathrm{ab}}}}$$

式中，$K_{\mathrm{a}}$、$K_{\mathrm{b}}$、$R_{\mathrm{a}}$、$R_{\mathrm{b}}$ 分别表示温差发电器热电偶 A 和 B 的总热导和总电阻。$\alpha_{\mathrm{ab}}$ 为相对塞贝克系数，$T_0$ 为热接点温度，设样品中产生线性的温度梯度，并忽略汤姆逊效应影响。

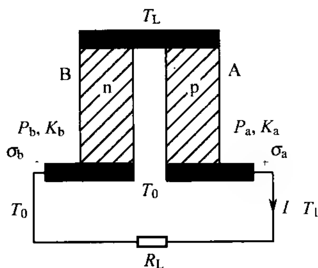



图 11-8

**解：** 如图 11-8 所示，两种材料 A 和 B 的一端接欧姆接触并维持温度 $T_0$，另一端温度保持 $T_1$ 且两端连接负载电阻 $R_{\mathrm{L}}$。

稳态时，由于温度差（$\Delta T=T_0-T_1$）而产生塞贝克电压（$\alpha_{\mathrm{ab}}\cdot\Delta T$）。因此，在电路中有电流 $I$ 流过，负载电阻两端得到 $R_{\mathrm{L}}I^2$ 的功率，从而实现热能转换为电能。

由于热量传导的连续性，在热电偶中任一截面上流入和流出热量的总和应该等于零。单位时间从高温端 $T_0$ 流出的热量有两部分：热传导流出热量 $Q_{\mathrm{k}}$ 和材料中流过电流引起的帕尔帖效应而产生的热量 $Q_{\mathrm{p}}$。

$$Q_{出}=Q_{\mathrm{k}}+Q_{\mathrm{p}}$$

流入高温端的热量也分为两部分：由于材料电阻而产生的焦耳热 $Q_{\mathrm{j}}$ 的一半流入高温端，另一端流入低温端，从高温端周围的介质流入的热量为 $Q_{\mathrm{a}}$，根据热量传导的连续性，有如下关系

$$Q_{\mathrm{a}}+\frac{1}{2}Q_{\mathrm{j}}=Q_{\mathrm{p}}+Q_{\mathrm{k}}$$

式中 $Q_{\mathrm{p}}=\pi_{\mathrm{ab}}I=\alpha_{\mathrm{ab}}T_0I$ （开耳芬第一关系式）；

$Q_{\mathrm{j}}=I^2(R_{\mathrm{a}}+R_{\mathrm{b}})$； $Q_{\mathrm{k}}=(K_{\mathrm{a}}+K_{\mathrm{b}})\cdot\Delta T$

代入上式得

$$Q_a = \alpha_{ab} T_0 \cdot I + (K_a + K_b)\Delta T - \frac{I^3}{2}(R_a + R_b)$$

当 $R_L = R_a + R_b$ 时，流过的电流 $I_0$ 为

$$I_0 = \frac{\alpha_{ab} \cdot \Delta T}{R_L + R_a + R_b} = \frac{\alpha_{ab} \cdot \Delta T}{2(R_a + R_b)}$$

在负载电阻 $R_L$ 上得到最大输出功率 $P_0$

$$P_0 = I_0^2 R_L = \frac{(\alpha_{ab} \cdot \Delta T)^2}{4R_L}$$

转换效率 $\eta$ 为（以 $I_0$ 代替 $Q_a$ 式中 $I$）

$$\eta = \frac{P_0}{Q_a} = \frac{\dfrac{{\alpha_{ab}}^2 \Delta T^2}{4R_L}}{\dfrac{\alpha_{ab} T_0 \Delta T}{2(R_a + R_b)} - \dfrac{{\alpha_{ab}}^2 \Delta T^2}{8(R_a + R_b)} + (K_a + K_b) \Delta T}$$

$$= \frac{\Delta T}{2T_0 - \dfrac{\Delta T}{2} + 4\dfrac{K_a + K_b(R_a + R_b)}{{\alpha_{ab}}^2}}$$

**【例 11-15】** 试求电子与空穴混合导电时材料的温差电动势率。并证明在本征情况下的温差电动势率为

$$\alpha_i(T) = -\frac{k_0}{q}\frac{b-1}{b+1}\left[3 + \frac{E_g}{2k_0 T}\right]$$

式中 $b = \frac{\mu_n}{\mu_p}$。

**解：**根据绝对温差电动势率的表达式：

电子的 $$\alpha_n(T) = -\frac{k_0}{q}\left[\frac{1}{k_0 T}\frac{\langle \tau v^2 E\rangle}{\langle \tau v^2\rangle} - \frac{E_F - E_c}{k_0 T}\right]$$

空穴的 $$\alpha_p(T) = \frac{k_0}{q}\left[\frac{1}{k_0 T}\frac{\langle \tau v^2 E\rangle}{\langle \tau v^2\rangle} - \frac{E_v - E_F}{k_0 T}\right]$$

如果弛豫时间与载流子能量之间的关系为 $\tau \propto E^s$，则

$$\frac{\langle \tau v^2 E\rangle}{\langle \tau v^2\rangle} = \frac{\int_0^\infty E^{s+\frac{5}{2}} e^{-\frac{E}{k_0 T}} dE}{\int_0^\infty E^{s+\frac{3}{2}} e^{-\frac{E}{k_0 T}} dE}$$

$$= k_0 T\left(s + \frac{5}{2}\right)$$

于是

$$\alpha_n(T) = -\frac{k_0}{q}\left[\left(s + \frac{5}{2}\right) - \frac{E_F - E_c}{k_0 T}\right]$$

$$\alpha_n(T) = \frac{k_0}{q}\left[\left(s + \frac{5}{2}\right) - \frac{E_v - E_F}{k_0 T}\right]$$

对于电子、空穴混合导电的情况，由于它们的温差电动势率有相反的符号，因而相互抵消一部分，混合导电的温差电动势率为

$$\alpha_{n,p}(T)=\frac{\alpha_n(T)qn\mu_n+\alpha_p qp\mu_p}{qn\mu_n+qp\mu_p}$$

$$=-\frac{k_0}{q(n\mu_n+p\mu_p)}\left\{\left[\left(s+\frac{5}{2}\right)-\frac{E_F-E_c}{k_0T}\right]n\mu_n-\left[\left(s+\frac{5}{2}\right)-\frac{E_v-E_F}{k_0T}\right]p\mu_p\right\}$$

如果是晶格散射为主，即取 $s=-\frac{1}{2}$，另外，由于

$$n=N_c e^{-\frac{E_c-E_F}{k_0T}},\quad N_c=\frac{2(2\pi m_n^* kT)^{3/2}}{h^3}$$

$$p=N_v e^{-\frac{E_F-E_v}{k_0T}},\quad N_v=\frac{2(2\pi m_p^* k_0T)^{3/2}}{h^3}$$

则

$$\alpha_{n,p}(T)=-\frac{k_0}{q(nb+p)}\left[2(nb-p)-nb\ln\frac{n}{N_c}+p\ln\frac{p}{N_v}\right]$$

这便是混合导电时的温差电动势率。

如果是本征导电，即 $n=p$，再进一步认为 $N_c\approx N_v$，则

$$\alpha_i(T)=-\frac{k_0}{q}\frac{b-1}{b+1}\left(2+\frac{E_c-E_i}{k_0T}\right)$$

式中 $E_i$ 为本征费米能级。由于 $E_c-E_i=\frac{E_g}{2}$，则

$$\alpha_i(T)=-\frac{k_0}{q}\frac{b-1}{b+1}\left(2+\frac{E_g}{2k_0T}\right)$$

这便是欲求的结果。

**【例 11-16】** 试证明在非简并情况下电子的热导率在晶格散射情况下为

$$\chi_e=\frac{2k_0^2T}{q}n\mu$$

式中 $n$ 为电子浓度，$\mu$ 为迁移率。

**证明：** 如果沿 $x$ 方向有温度梯度 $\frac{dT}{dx}$，则高温处的电子流向低温处，在样品中形成电场。这时电子的分布函数也是 $x$ 的函数。温度梯度引起的分布函数的变化速率为

$$\frac{df_1}{dt}=\frac{df_1}{dx}\frac{dx}{dt}=v_x\frac{df_1}{dx}$$

所以由电场及温度梯度同时存在时引起的漂移项为

$$\left(\frac{df_1}{dt}\right)_d=-\frac{q\mathscr{E}}{m_n^*}\frac{df_1}{dv_x}+v_x\frac{df_1}{dx}\tag{1}$$

于是在弛豫时间近似条件下玻尔兹曼方程为

$$-\frac{q\mathscr{E}}{m_n^*}\frac{\mathrm{d}f_1}{\mathrm{d}v_x}+v_x\frac{\mathrm{d}f_1}{\mathrm{d}x}=-\frac{f_1-f_0}{\tau} \tag{2}$$

式中 $m_n^*$ 为电子有效质量，$\tau$ 为弛豫时间，$f_1$ 及 $f_0$ 分别是有电场及温度梯度时的稳态分布函数及无扰动情况下平衡态分布函数。

如果电场及温度场对分布函数的扰动是微小的，可用 $f_0$ 代替式(2)左端的 $f_1$，于是得

$$f_1=f_0+\tau\left[\frac{q\mathscr{E}}{m_n^*}\frac{\mathrm{d}f_0}{\mathrm{d}v_x}-v_x\frac{\mathrm{d}f_0}{\mathrm{d}x}\right] \tag{3}$$

为研究样品中的电流或热流，只需考虑 $f_1$ 中去掉 $f_0$ 的部分。因为 $f_0$ 是描写热平衡状态，对电流及热流皆无贡献，于是可得样品中的电流及热流分别为

$$j_x=-q\int_0^\infty v_x\tau\left[\frac{q\mathscr{E}}{m_n^*}\frac{\mathrm{d}f_0}{\mathrm{d}v_x}-v_x\frac{\mathrm{d}f_0}{\mathrm{d}x}\right]N(E)\mathrm{d}E \tag{4}$$

$$W_x=\int_0^\infty V_xE\tau\left[\frac{q\mathscr{E}}{m_n^*}\frac{\mathrm{d}f_0}{\mathrm{d}v_x}-v_x\frac{\mathrm{d}f_0}{\mathrm{d}x}\right]N(E)\mathrm{d}E \tag{5}$$

式中

$$N(E)=\frac{4\pi(2m_n^*)^{3/2}}{h^3}E^{1/2} \tag{6}$$

为能量极小值附近的能级密度。

假如在稳定状态，没有电流通过，即 $j_x=0$（但这时 $\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}x}\neq 0,\mathscr{E}\neq 0$），可从式(4)解得 $\mathscr{E}$ 代入式(5)，即消去了式(5)中的 $\mathscr{E}$。另外

$$\frac{\mathrm{d}f_0}{\mathrm{d}x}=-\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}x}\frac{\mathrm{d}f_0}{\mathrm{d}E}\left[T\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}T}\left(\frac{E_F}{T}\right)+\frac{E}{T}\right]$$

根据以上关系可得

$$Q_T=-x\mathrm{e}^{\Delta T}\qquad W_x=\frac{2}{3m_n^*}\frac{1}{T}\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}x}\left(K_3-\frac{K_2^2}{K_1}\right)$$

根据热导率的定义式（$Q_T=-x\mathrm{e}^{\Delta T}$，式中 $Q_T$ 为热能流度，$\Delta T$ 为温度梯度）得

$$\chi_e=-\frac{W_x}{\mathrm{d}T/\mathrm{d}x}=\frac{2}{3m_n^*}\frac{1}{T}\left(K_3-\frac{K_2^2}{K_1}\right) \tag{7}$$

式中

$$K_i=\int_0^\infty \tau N_c(E)E^i\frac{\mathrm{d}f_0}{\mathrm{d}E}\mathrm{d}E$$

如果取弛豫时间 $\tau=\alpha E^p$，并利用经典统计

$$f_0(E)=\exp\left(\frac{E_F-E}{k_0T}\right)$$

则得

$$K_i=-\frac{2}{\sqrt{\pi}}\alpha n(k_0T)^{p+i-1}\Gamma\left(p+i+\frac{3}{2}\right)$$

于是由式(7)得

$$\chi_e=\frac{4}{3\pi^{1/2}}\frac{\alpha n}{m_n^*}\frac{1}{T}(k_0T)^{p+2}\Gamma\left(p+\frac{7}{2}\right) \tag{8}$$

如果弛豫时间与能量关系为

$$\tau = l\left(\frac{m_n^*}{2E}\right)^{1/2} = l\left(\frac{m_n^*}{2}\right)^{1/2} E^{-\frac{1}{2}}$$

式中 $l$ 为电子的平均自由程;另外注意到

$$\Gamma(n) = (n-1)!$$

则式(8)中 $\alpha = l\left(\frac{m_n^*}{2}\right)^{1/2}$, $p = -\frac{1}{2}$, 得

$$\chi_e = \frac{8nk_0^2 Tl}{3(2\pi m_n^* k_0 T)^{1/2}} \tag{9}$$

考虑到漂移迁移率的理论表达式

$$\mu = \frac{4lq}{3(2\pi m_n^* k_0 T)^{1/2}}$$

将式(9)可写成欲求的表示形式

$$\chi_e = \frac{2k_0^2 Tn\mu}{q}$$

# 第 12 章　半导体磁和压阻效应

**主题词**

霍尔效应，磁阻效应，热磁效应，光磁电效应，压阻效应。

## 12.1　理论概要与重点分析

（1）把通有电流的半导体放在磁场中，在垂直于电流和磁场的方向上会产生横向电场，这个现象称为霍尔效应。横向电场称为霍尔电场。霍尔效应的实质是带电粒子在磁场中运动受到洛仑兹力作用的结果。

实验测定表明：霍尔电场 $E_y$ 与电流密度 $j_x$ 和磁感应强度 $B_z$ 成正比，即

$$E_y = R_H j_x B_z \tag{12.1}$$

比例系数 $R_H$ 称为霍尔系数。对于不同的材料，其弱场霍尔系数 $R_H$ 如表 12-1 所示。

**表 12-1**

| | | n 型半导体 | p 型半导体 |
|---|---|---|---|
| 一种载流子导电 | 不计入速度分布 | $R_H = -\frac{1}{nq}$ | $R_H = \frac{1}{pq}$ |
| | 计入载流子速度统计分布 | $R_H = -\frac{1}{nq}\frac{\langle\tau^2 v^2\rangle\langle v^2\rangle}{\langle\tau v^2\rangle^2}$ | $R_H = \frac{1}{pq}\frac{\langle\tau^2 v^2\rangle\langle v^2\rangle}{\langle\tau v^2\rangle^2}$ |
| 两种载流子导电 | 不计入速度分布 | $R_H = \frac{1}{q}\frac{(p-nb^2)}{(p+nb)^2}$ | |
| | 计入载流子速度统计分布 | $R_H = \frac{\mu_H}{\mu}\frac{1(p-nb^2)}{q(p+nb)^2}$<br>式中，$\mu_H$ 为霍尔迁移率 | |

利用霍尔效应可以判断半导体材料的导电类型，测量半导体的载流子浓度和迁移率。低温下霍尔效应试验还是研究半导体材料补偿度和杂质电离的有效方法。利用霍尔效应可制成霍尔器件，且由于霍尔器件可在静止状态下感受磁场，多数载流子工作，响应频率宽、寿命长、可靠性高，因而得到广泛的应用。

（2）在磁场的作用下，半导体的电阻要增大，这种效应称为磁阻效应。它可分为两种，一种是半导体的电阻率随磁场增大而增大，这种效应称为物理磁阻效应。另一种磁阻效应与样品的形状有关，不同几何形状的样品，在同样大小的磁场作用下，其电阻不同，这种效应称为几何磁阻效应。

若磁场和外加电场相互垂直时，产生的磁阻效应称为横向磁阻效应。通常用电阻率的相对改变形容磁阻。

$$\frac{\Delta\rho}{\rho_0}=-\frac{\Delta\sigma}{\sigma_0}=\xi\mu_{\mathrm{H}}^2B_z^2 \tag{12.2}$$

式中，$\xi$为横向磁阻系数，考虑载流子速度的统计分布，当磁场不太强（$\mu_{\mathrm{H}}B\ll 1$）时，对等能面为球面的非简并半导体，有

一种载流子导电时：
$$\xi=\frac{\langle\tau^3v^2\rangle\langle\tau v^2\rangle}{\langle\tau^2v^2\rangle^2}-1 \tag{12.3}$$

两种载流子导电时：
$$\xi=\frac{npb(1+b)^2}{(nb^2-p)^2} \tag{12.4}$$

式中，$b=\mu_{\mathrm{n}}/\mu_{\mathrm{p}}$。

（3）有温度梯度或有电流存在时，再把半导体置于磁场中，此时会观察到一些热电现象称为热磁效应。其根源在于带电粒子运动受到的洛仑兹力作用引起的。热磁现象包括：

① 爱廷豪森效应：当$x$方向通电流，$z$方向加磁场，沿$y$方向会产生温度梯度$\frac{\partial T}{\partial y}$，其值和$B_z$、$J_x$之积成正比，即

$$\frac{\partial T}{\partial y}=PJ_xB_z \tag{12.5}$$

式中，$P$为爱廷森豪系数，单位为($\mathrm{m^3\cdot K/J}$)。

② 能斯脱效应：当热流沿$x$方向通过样品时，在$z$方向加磁场，沿$y$方向会产生电动势。若改变磁场或热流的方向，电动势方向也将改变，电动势所决定的横向电场大小与$\frac{\partial T}{\partial x}$和$B_z$成正比。即

$$E_y=-\eta\frac{\partial T}{\partial x}B_z \tag{12.6}$$

式中，$\eta$为能斯脱系数，单位为($\mathrm{m^2/K\cdot s}$)。

③ 里纪—勒杜克效应：当有热流$\left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)$通过样品时，与样品表面垂直的磁场$B_z$，可使样品的两旁产生温差$\left(\frac{\partial T}{\partial y}\right)$，如改变磁场方向，则温度梯度方向随之改变。这种现象称为里纪—勒杜克效应。$\frac{\partial T}{\partial y}$与$B_z$及$\frac{\partial T}{\partial x}$成正比，即

$$\frac{\partial T}{\partial y}=S\frac{\partial T}{\partial x}B_z \tag{12.7}$$

式中，$S$为里纪 -勒杜克系数，单位为($\mathrm{m^2/V\cdot S}$)。

（4）光磁电效应：用能被半导体强烈吸收的光照射，在半导体表面薄层产生光生载流子，电子和空穴均向内部做扩散运动，再把样品置于与入射光垂直的磁场中，在垂直于磁场和载流子扩散方向产生横向电场，这种现象称为光磁电效应。产生电场的原因是磁场使向同一方向扩散的电子和空穴，分别向横向两端偏转形成的。光磁电效应，可用来测量短寿命半导体的非子寿命和制作红外探测器。

（5）压阻效应是指应变引起半导体的电阻率变化。其物理原因在于，应变使半导体

能带结构发生变化。对于导带为多能谷的半导体材料(如 n-Si,n-Ge 的导带,极值点分别在⟨100⟩和⟨111⟩的多个对称方向上,极值附近的等能面为多个旋转椭球面),单轴应力引起晶体各向异性应变,使导带中各个等同能谷相对位置发生变化,引起电子在各能谷中的重新分布,从而改变载流子的迁移率,即改变了半导体电阻率。半导体在液体静压强作用下,晶体对称性不受影响,仅使能带极值发生移动而使禁带宽度发生变化。禁带宽度的变化引起载流子浓度的变化,因而使电阻率变化。

p 型硅中观察到较显著的压阻效应,是由于各向异性应力解除了能带简并,使轻、重空穴带中载流子重新分布。由于轻、重空穴迁移率不同,重新分布后的总迁移率发生变化,即使空穴总数保持不变,也会使电阻率发生变化。

利用半导体的压阻效应可以制作各种力敏感器件,而得到广泛应用。

## 12.2 概念思考与练习题

**【12-1】** 霍尔电压是如何产生的? 一块掺杂较重的 n 型半导体,加上如图 12-1 所示的电磁场以后,试判定霍尔电场的方向。甲认为:在电场 $E_x$ 作用下,电子向左运动,受磁场 $B_z$ 作用后向($-y$)方向偏转,得到的电场 $E_y$ 如图中左边所示。乙认为:电子向左边运动等效于空穴向右运动,空穴受到磁场 $B_z$ 作用后向($+y$)方向偏转,得到如图中右边所示的电场。试指出正误,并简要说明之。

**【12-2】** 解释 p 型半导体霍尔系数随温度变化改变符号的原因。试求弱场条件下改变符号时,电子和空穴浓度的比例。

**【12-3】** 用 5Ω · cm 的 n-Si 作霍尔系数测试样片,"因为 $R_H=\frac{V_H d}{I_x B_z}$,所以样片做得厚一些,霍尔系数就会大些"。这种说法对吗? 为什么?

**【12-4】** 两种材料和几何形状完全相同的样品,按图 12-2 所示的方式平行地置于均匀磁场中。当两块样品沿相同方向通以相同电流时,问霍尔电场方向是否相同? 电场强度哪个大? 霍尔电势差哪个大? 为什么?

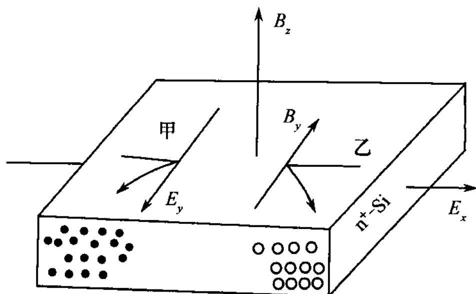


图 12-1 题 12-1 用图

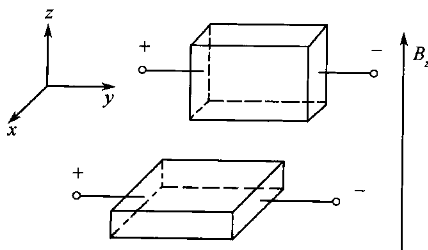


图 12-2 题 12-4 用图

**【12-5】** 何谓霍尔角？与磁场强度 $B_z$ 和载流子迁移率的关系如何？

**【12-6】** 两种载流子对霍尔效应都有贡献的 InSb 材料，掺杂浓度为 $N_D=5\times10^{14}$ $cm^{-3}$，其霍尔系数与温度关系如图 12-3 所示。说明霍尔系数随温度变化的原因。

**【12-7】** p 型锑化铟的霍尔系数 $R_H$ 与温度的关系如图 12-4 所示，虚线和实线代表不同的掺杂浓度。每个样品的曲线都包含两支；右面低温区 $R_H$ 为正值，左面高温区一支为负值。试分段说明 $R_H$ 随温度变化的规律并予以解释。

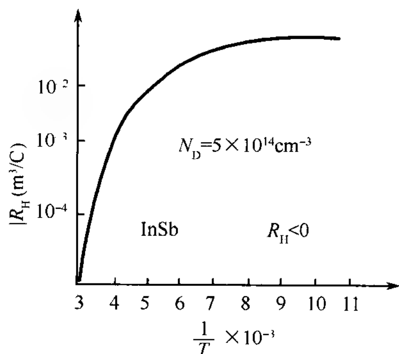



图 12 3　题 12 6 用图

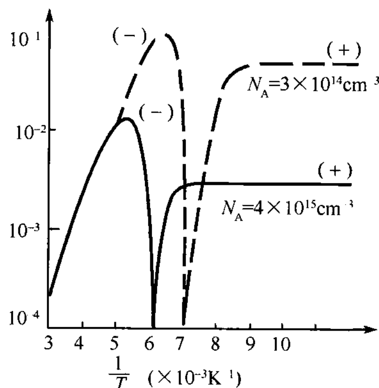



图 12-4　题 12-7 用图

**【12-8】** 低温下测量霍尔系数是一种测定杂质电离能的有效方法。试说明测试原理并设计测定 n 型半导体杂质能级的霍尔实验。

**【12-9】** 为什么半导体的霍尔效应比金属大得多？

**【12-10】** 一稳定的光照射置于恒定磁场中 n 型半导体样品（$n_0\gg p_0$），测量其光磁电效应的横向电势差。样品尺寸为：$l=3$cm，$b=2$cm，$d=1$cm（如图 12-5 所示），少子扩散长度 $L_p=10\mu$m，一共测量三次。

第一次：$x$ 方向光照，$z$ 方向加磁场；

第二次：$z$ 方向光照，($-y$) 方向加磁场；

第三次：$y$ 方向光照，$z$ 方向加磁场。哪一次测量的横向电势差最大？哪一次测量的横向电势差最小？

**【12-11】** 图 12-6 中，(a)为 n 型样品，(b)为 p 型样品，所加的电流 $I_x$ 和磁场 $B_z$ 的方向如图所示。试画出霍尔电场的方向并指明由于爱廷豪森效应所造成的温度高的面和温度低的面。

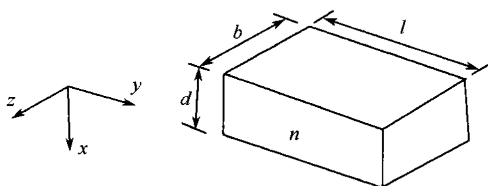



图 12-5　题 12 10 用图

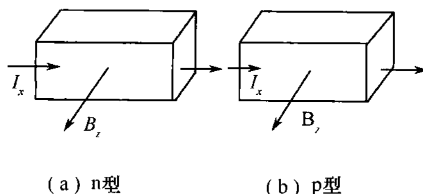



图 12-6　题 12-11 用图

【12-12】 热磁电效应有哪几种？分别画出简单示意图表示之。

【12-13】 比较并区别下述物理概念：电导迁移率，霍尔迁移率，漂移迁移率。

【12-14】 某块重掺杂的 p 型半导体样品，其上所加 $j_x$ 和 $B_z$ 已确定。室温下，甲认为：若掺杂 $N_A$ 越大，空穴浓度 p 越大，则受洛仑磁力作用偏转到样品侧面的空穴就越多，故霍尔效应越显著。乙认为：若掺杂 $N_A$ 越大，则 $R_H$ 越小，霍尔效应越不显著。试指出正误，并定性分析之。

【12-15】 图 12-7 是在考虑载流子速度统计分布时，说明 n 型半导体产生磁阻效应的原理图，问哪一个是正确的？图中(1)表示洛仑磁力与霍尔电场力相平衡的电子的运动；(2)表示较大速度的电子的运动；(3)表示速度较小的电子的运动。

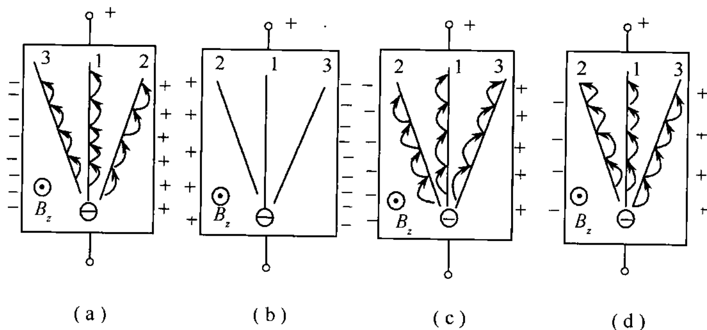



图 12-7 题 12-15 用图

【12-16】 试分析如图 12-8 所示的光磁电效应引起的电场方向，并指出它与霍尔效应的区别。

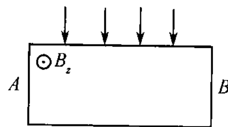



图 12-8 题 12-16 用图

【12-17】 两个几何形状完全相同的样品，一个是掺杂 $N_D=10^{16}\text{cm}^{-3}$ 的 n 型硅，一个是掺杂 $N_A=10^{16}\text{cm}^{-3}$ 的 p 型硅，今以相同频率的二束光强相等的光照两样品的相应表面，两样品的吸收系数和量子效率均相等，表面的透射系数也相等，产生的丹倍电势差哪个大？场强哪个大？为什么？

【12-18】 何谓半导体的压阻效应？压阻效应的强弱之分中为何强型地依赖于晶体的方向性？这种方向性用一个叫做压阻系数的参数来表征，严格说压阻系数是一个四级张量，但最后分析出三个基本系数 $\pi_{11}$、$\pi_{12}$ 和 $\pi_{44}$，它们分别称作什么压阻系数，是如何定义的？

【12-19】 实验发现，n-Ge 在液体静压强作用下电阻率也随压强而变化，在压强低于 100MPa 时，电阻率随压强增大而稍有增大，超过 100MPa 后，电阻率随压强增而迅速增大。电阻率的变化是由什么原因引起的？为什么在不同的压力范围电阻率随压强的变化率有显著的不同？

【12-20】 定性说明为什么 n-Si 沿[111]加应力，在[111]方向通电流测电阻时的压阻系数比较小？

【12-21】 沿 n-Ge 的[110]方向施加单轴应力，测量[110]方向的电阻，施加压应力时电阻变大还是变小？同样的测量方法，对 p-Ge 电阻率变大还是变小？

【12-22】 试说明 p 型半导体压阻效应产生的原理。

【12-23】 已知 n-Si 在液体静压强的作用下，压强增大，禁带宽度减小。据此判断当 n-Si 受到[100]方向的单轴拉应力时，分别说明[100]、[010]、[001]方向上的能谷值升高还是降低？电子又是如何转移的？

【12-24】 对 n-Si 和 n-Ge 施加单轴应力，为使其电阻率变化最大，应力应分别加在什么方向上？为使电阻率变化最小应力应加在什么方向上？为什么？

# 12.3 典型例题解析

**【例 12-1】** 一个磁场 $B$ 和一个电场 $E$ 相互垂直（如图 12-9 所示）。设一个电子在原点由静止开始运动，试确定该电子的运动轨迹。

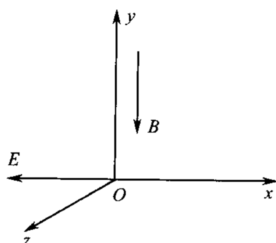



图 12-9 例 12-1 题用图

**解**：电场 $E$ 作用在电子上的力指向 $+x$ 轴，磁场 $B$ 所形成的洛仑兹力总与 $B$ 垂直。因此，电子在 $y$ 方向上不受力的作用。故列出电子的运动方程如下

$$m_0 \dot{v}_x = qE - qv_z B \tag{1}$$

$$m_0 \dot{v}_z = qv_z B \tag{2}$$

由式(1)得

$$\frac{\mathrm{d}v_z^2}{\mathrm{d}t^2} = -\frac{qB}{m_0}\frac{\mathrm{d}v_z}{\mathrm{d}t} = -\omega\frac{\mathrm{d}v_z}{\mathrm{d}t} = -\omega\frac{\mathrm{d}v_z}{\mathrm{d}t}$$

$$\left(\omega = \frac{qB}{m}\right)$$

由式(2)得

$$\frac{\mathrm{d}v_z}{\mathrm{d}t} = \frac{qB}{m_0}v_z$$

代入上式得

$$\frac{\mathrm{d}v_z^2}{\mathrm{d}t^2} = -\omega^2 v_z \tag{3}$$

设式(3)解为 $\quad v_z = A\cos\omega t + B\sin\omega t$

式中，$A$ 和 $B$ 是由初始条件确定的常数，当 $t=0$ 时，$v_x = v_z = 0$，所以 $A=0$ 。故

$$v_z = B\sin\omega t$$

又根据式(1)：当 $t=0$，$\frac{\mathrm{d}v_z}{\mathrm{d}t} = \frac{qE}{m_0}$（因为 $v_z = 0$），故

$$B\omega = \frac{qE}{m_0}$$

所以

$$B = \frac{qE}{m_0\omega} = \frac{E}{B} = u$$

故

$$v_z = u\sin\omega t \tag{4}$$

把 $v_z$ 代入式(1)可求得

$$v_z = u - \frac{1}{\omega}\frac{\mathrm{d}v_z}{\mathrm{d}x} = u - u\cos\omega t \tag{5}$$

由式(4)得

$$x = \int v_z \mathrm{d}x = \int u\sin\omega t\,\mathrm{d}t = -\frac{u}{\omega}\cos\omega t + c$$

因为当 $t = 0$ 时,$x = 0$,所以式中常数 $c = \frac{u}{\omega}$。故

$$x = \frac{u}{\omega}(1 - \cos\omega t)$$

由式(5)得

$$Z = \int v_z \mathrm{d}t = \int (u - u\cos\omega t)\mathrm{d}t = ut - \frac{u}{\omega}\sin\omega t + D$$

因为 $t = 0, Z = 0$,所以式中常数 $D = 0$,故

$$Z = ut - \frac{u}{\omega}\sin\omega t$$

由

$$x = \frac{u}{\omega}(1 - \cos\omega t)$$

$$Z = ut - \frac{u}{\omega}\sin\omega t$$

可以看出:电子的运动轨迹是一个普通的圆滚线:即半径为 $\frac{u}{\omega}$ 的一个圆,沿着如图 12-10所示的直线(即 $z$ 轴)滚动,由圆周上一个点形成的轨迹。

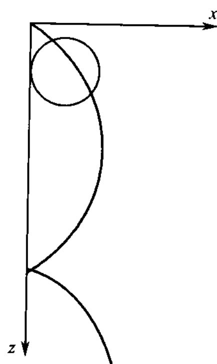


图 12-10

**【例 12-2】** 长 30mm,宽 6mm,厚 1mm 的 p 型半导体样品,其电阻值为 500Ω。把它放置于垂直样品平面的 0.5T 的磁场中,当通过样品的电流为 10mA 时,出现 5mV 的霍尔电压。试求半导体样品的霍尔迁移率和载流子浓度。

**解:** 半导体的电导率为

$$\sigma = \frac{l}{RA} = p_0 q \mu_p$$

式中,$l$ 是半导体的长度;$A$ 是它的截面积;$R$ 为其电阻。

霍尔系数为 $$R_H = \frac{1}{p_0 q} = \frac{V_H d}{BI}$$

所以

$$p_0 = \frac{BI}{qV_H d} = \frac{0.5 \times 10 \times 10^{-3}}{1.6 \times 10^{-19} \times 5 \times 10^{-3} \times 1 \times 10^{-3}} = 6.25 \times 10^{21}(\mathrm{m}^{-3})$$

霍尔迁移率

$$\mu_H = R_H \sigma_p = \frac{l}{p_0 q R A}$$

$$= \frac{30 \times 10^{-1}}{1.6 \times 10^{-19} \times 6.25 \times 10^{15} \times 500 \times 1 \times 6 \times 10^{-2}}$$

$$= 10^2 [\mathrm{cm^2 (V \cdot s)}]$$

**【例 12-3】** 试证明：电导率为最小值时硅的霍尔系数

$$R_H = \frac{1}{q} \frac{1-b}{4n_i \sqrt{b}}$$

式中，$b = \frac{\mu_n}{\mu_p}$，$\mu_n$、$\mu_p$ 分别为电子和空穴的迁移率，$n_i$ 为本征载流子浓度（不考虑载流子的速度统计分布）。

**解**：对于有两种载流子参与导电的半导体，其霍尔系数和电导率分别为

$$R_H = \frac{1}{q} \frac{p - nb^2}{(p + nb)^2} \qquad (式中：b = \mu_n / \mu_p)$$

$$\sigma = nq\mu_n + pq\mu_p$$

又因为

$$np = n_i^2$$

所以

$$\sigma = nq\mu_n = \frac{n_i^2}{n} q\mu_p$$

故当 $\frac{d\sigma}{dn} = q\mu_n - \frac{n_i^2}{n^2} q\mu_p = 0$ 时，电导率有极小值。此时，对应

$$n = n_i \sqrt{\frac{\mu_p}{\mu_n}} = \frac{n_i}{\sqrt{b}}$$

$$p = n_i = \sqrt{\frac{\mu_n}{\mu_p}} = n_i \sqrt{b}$$

代入霍尔系数 $R_H$ 的表达式即得

$$R_H = \frac{1}{q} \frac{(1-b)}{4n_i \sqrt{b}}$$

即得证。

**【例 12-4】** 一个锑化铟样品，室温时的空穴浓度为电子浓度的 9 倍，试计算霍尔系数 $R$ 的数值，并指出样品的导电类型。在这个问题中，能否根据霍尔系数的正负来判别导电类型？设室温时 $b = \mu_n / \mu_p = 100$，$n_i = 1.1 \times 10^{16} \mathrm{cm^{-3}}$。

**解**：由题意知 $p = 9n$，又 $np = n_i^2$，故可求得

$$n = \frac{1}{3} n_i, \quad p = 3n_i$$

将上述结果代入两种载流子的霍尔系数表达式：

$$R = \frac{p - nb^2}{q(p + nb)^2} = \frac{9 - b^2}{q(9 + b)^2} \frac{3}{n_i} \approx \frac{b^2}{(9+b)^2} \frac{3}{n_i q}$$

$$= -\left(\frac{100}{109}\right)^2 \times \frac{3}{1.1 \times 10^{16} \times 1.6 \times 10^{-19}}$$

$$= -1.3 \times 10^3 (\mathrm{cm^3/C})$$

根据 $p=9n$，样品当然是 p 型的。由于 p 型样品在高温区霍尔系数改变符号，所以，尽管在室温下 $R<0$，样品却是 p 型的。由此例可知。当两种载流子对导电的贡献都不能忽略时，不能用 $R$ 的符号来判别导电类型。对于一个确定的样品，只有在一种载流子对导电起主要作用的较低温度范围内，才能依据 $R$ 的正负判断导电类型。

**【例 12-5】** 为了判断锗的导电类型，测得它的霍尔系数为负，而塞贝克系数为正，该材料的导电类型是什么？说明理由。

**解：** 该材料为 p 型锗。

因为有两种载流子参加导电的霍尔系数为

$$R_{\mathrm{H}} - \frac{p\mu_{\mathrm{p}}^2 - n\mu_{\mathrm{n}}^2}{q(p\mu_{\mathrm{p}} + n\mu_{\mathrm{n}})^2}$$

虽然 $R_{\mathrm{H}}<0$，即 $p\mu_{\mathrm{p}}^2<n\mu_{\mathrm{n}}^2$，但因为 $\mu_{\mathrm{n}} \gg \mu_{\mathrm{p}}$，所以即是在 $p>n$ 的情况下也可以得到负的霍尔系数，因此，由 $R_{\mathrm{H}}$ 的正负不能判定半导体的导电类型。

有两种载流子导电时的塞贝克系数

$$\alpha_{\mathrm{S}} = \frac{k_0\left[p\mu_{\mathrm{p}}\left(\frac{3}{2}+\xi_{\mathrm{p}}\right) - n\mu_{\mathrm{n}}\left(\frac{3}{2}+\xi_{\mathrm{n}}\right)\right]}{q(p\mu_{\mathrm{p}} + n\mu_{\mathrm{n}})}$$

式中

$$\xi_{\mathrm{n}} = -l_{\mathrm{n}} - \frac{n}{N_{\mathrm{c}}} > 0, \xi_{\mathrm{p}} = -l_{\mathrm{n}}\frac{p}{N_{\mathrm{n}}} > 0$$

由 $\alpha_{\mathrm{S}}>0$，又因为 $\mu_{\mathrm{n}} \gg \mu_{\mathrm{p}}$，故必定得

$$p > n$$

即塞贝克系数为正，该材料必定为 p 型半导体。

**【例 12-6】** 声波以 $v_{\mathrm{s}} = 2 \times 10^3$ m/s 的速度在 n 型半导体中传播，产生形变势效应，使势能沿声波传播的 $x$ 方向发生正弦波变化 $\Delta E_{\mathrm{c}}$，如图 12-11 所示。不在能谷 $B$ 和 $D$ 处的电子就要往能谷底运动。设在正弦波的势能保持不变的情况下电子从 $A$ 运动到 $B$，或从 $C$ 运动到 $B$ 的平均速度的绝对值为 $V_{\mathrm{e}} = 1.2 \times 10^3$ m/s，载流子浓度 $n = 5 \times 10^6$ /cm$^3$。问载流子处在波前(如 $A$ 到 $B$)的平均浓度是多少？占总体的百分比是多少？

**解：** 因为 $v_{\mathrm{s}} > v_{\mathrm{e}}$，所以处在 $AB$ 位置上的电子不能"滑到谷底"而是以 $(v_{\mathrm{s}} - v_{\mathrm{e}})$ 的速度相对 $\Delta E_{\mathrm{c}}$ 的正弦波向上运动，即相对晶体而言，电子是往 $x$ 方向运动，$B$ 处的电子经过 $t_1$ 时间爬到 $BC$ 段某处后，以 $(v_{\mathrm{s}} + v_{\mathrm{e}})$ 的速度在波后向下滑：设电子在波后等待的平均时间为 $t_1$，则

$$t_1 = \frac{\lambda}{2}/(v_{\mathrm{s}} - v_{\mathrm{e}})$$

$$t_2 = \frac{\lambda}{2}/(v_{\mathrm{s}} + v_{\mathrm{e}})$$

故可认为波前($AB$)平均电子浓度与波后平均电子浓度比等于 $t_1/t_2$，即

$$\frac{n_1}{n_2} = \frac{t_1}{t_2}$$

波前电子平均浓度与总的电子浓度比为

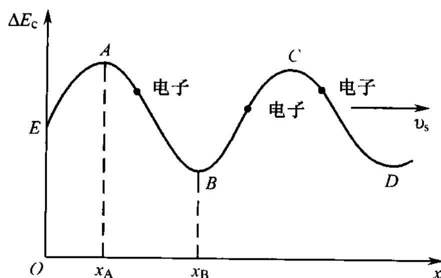



图 12-11

$$\frac{n_1}{n}=\frac{t_1}{t_1+t_2}=\frac{\frac{\lambda}{2}/(v_s-v_e)}{\frac{\lambda}{2}/(v_s-v_e)+\frac{\lambda}{2}/(v_s+v_e)}$$

$$=\frac{v_s+v_e}{2v_s}=\frac{2\times10^3+1.2\times10^3}{2\times2\times10^3}=80\%$$

所以 $$n_1=\frac{v_s+v_e}{2v_s}=n=5\times10^{16}\times80\%=4\times10^{16}(1/\text{cm}^3)$$

由此题可知，在 $v_s$ 与 $v_e$ 比较接近时，大部分电子处在波前的位置，是沿声波传播方向运动的。当 $v_s$ 和 $v_e$ 差别很大，在波前的电子与在波后的电子相差不大。

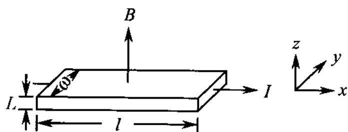



图 12-12

**【例 12-7】** 图 12-12 为一个 n 型锗样品，厚度 $t=0.2$mm。当沿长度 $l$ 方向有强度为 10mA 的电流通过时，在与电流垂直的方向上加 $B=0.1$ T 的磁场，测得霍尔电势差 $V_H=-10$mV，求霍尔系数及霍尔角。[设 $\mu_n=4000\text{cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$]

**解：** 由题目给出的条件可知霍尔电场

$$\mathscr{E}_y=\frac{V_H}{W}$$

由一种载流子的霍尔效应的霍尔电场 $\mathscr{E}_y=Rj_xB_z$，式中 $j_x$ 为流过样品的电流密度，$B_z$ 为磁感应强度，$R$ 为霍尔系数。式可得

$$\frac{V_H}{W}=R_nj_xB_z$$

所以

$$R_n=\frac{V_nt}{IB_z}=-2\times10^{-3}(\text{m}^3/\text{C})$$

另外，如果样品两端电压为 $V$，则

$$\sigma=nq\mu_n=\frac{Il}{WVt}$$

$$V=\frac{Il}{nq\mu_nWt}$$

设沿电流方向的电场为 $\mathscr{E}_x$，则 $V=\mathscr{E}_x l$，于是得

$$\mathscr{E}_x=\frac{I}{nq\mu_n Wt}$$

根据霍尔角定义得

$$\tan\theta_n=\frac{\mathscr{E}_y}{\mathscr{E}_x}=\frac{V_H nq\mu_n t}{I}$$

式中载流子浓度 $n=-\frac{1}{R_n q}$，所以得

$$\tan\theta=-\frac{V_H\mu_n t}{R_n I}=-\mu_n B=-4\times10^{-3}(\text{rad})$$

**【例 12-8】** 设某一样品在温度为 $T_0$ 时测得的霍尔系数 $R(T_0)=0$，以及电导率 $\sigma(T_0)=\sigma_0$。在稍微低于 $T_0$ 的温度时所有受主全部电离，空穴浓度达到饱和值 $p_s=N_a-N_d$，这时可认为电子浓度 $n\approx0$。当温度升高进入本征区时空穴浓度 $p=p_s+n$，若取 $T_0$ 时的空穴浓度近似与本征时的相等，试证明

$$\frac{\sigma_0}{\sigma_s}=\frac{b}{b-1}$$

**证明：** 由给定条件 $T_0$ 时 $R(T_0)=0$，从两种载流子霍尔系数[教材《半导体物理学》(第七版)372 页]知，

$$R=\left(\frac{\mu_H}{\mu}\right)\frac{p-nb^2}{q(p+nb)^2}=0$$

所以在 $T_0$ 时有

$$p_0=nb^2$$

故 $T_0$ 时的电导率为

$$\begin{aligned}\sigma_0&=q(n\mu_n+p_0\mu_p)\\&=nq(\mu_n+b^2\mu_p)\end{aligned}$$

在 $T<T_0$ 的饱和电离区

$$\sigma_s=p_s q\mu_p$$

在 $T>T_0$，进入本征区时 $p=p_s+n$，及题中给的条件有

$$p=p_s+n\approx nb^2$$

所以

$$p_s=n(b^2-1)$$

$$\sigma_s=n(b^2-1)q\mu_r$$

最后得

$$\frac{\sigma_0}{\sigma_s}=\frac{nq(\mu_n+b^2\mu_p)}{nq\mu_p(b^2-1)}=\frac{b}{b-1}$$

**【例 12-9】** 试用图表示出霍尔效应、爱廷豪森效应、能斯脱效应及里纪—勒杜克效应中相关量的方向关系，并加以分析。

**解**：对于霍尔效应，如图 12-13(a)所示，在 $x$ 方向通有电流 $j_x$、$z$ 方向加磁场 $B_z$，则在 $y$ 方向出现电势差 $\Delta V_H$(或霍尔电场 $\mathscr{E}_H$)。同时在 $y$ 方向出现一温度差 $\Delta T$(或温度梯度)，这就是爱廷豪森效应，如图 12-13(b)所示。

霍尔电场的方向随电流方向、磁场方向及载流子带电符号有关。爱廷豪森效应的温度差是由载流子速度不同引起的。对 n 型样品带负电的面温度高，霍尔电场方向与温度梯度方向相反；对 p 型样品，带正电的面温度高，霍尔电场方向与温度梯度方向一致。

如果在 $x$ 方向有热流 $W$，$z$ 方向加磁场 $B_z$，则在 $y$ 方向出现一电势差 $\Delta V_N$(或电场 $\mathscr{E}_N$)，这便是能斯脱效应，如图 12-13(c)所示。同时在 $y$ 方向出现一温度差 $\Delta T$(或温度梯度)。这便是里纪 –勒杜克效应，如图 12-13(d)所示。

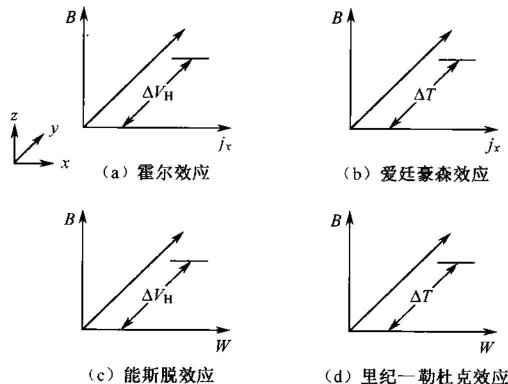



图 12 13　热磁电效应中相关量的关系

从另一方面来看，霍尔效应及能斯脱效应都是在 $y$ 方向产生一电势差，但前者由电流引起，后者由热流引起。爱廷豪森效应及里纪—勒杜克效应都是在 $y$ 方向产生一温度差，也是一个由电流引起，一个由热流引起。

**【例 12-10】** InSb 电子迁移率为 $7.8\text{m}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$，空穴的迁移率为 $780\text{cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$，本征载流子浓度为 $1.6\times10^{16}\text{cm}^{-3}$，求 300 K 时

(1) 本征材料的霍尔系数；

(2) 室温时测得 $R_H=0$，求载流子浓度；

(3) 本征电阻率；

(4) 当 $B_z=0.1\ \text{Wb/m}^2$ 时，计入长声学波散射时材料的电阻率。

**解**：(1)两种载流子的霍尔系数为

$$R_H=\frac{p-nb^2}{q(p+bn)^2} \tag{1}$$

本征半导体的霍尔系数为

$$R_H=\frac{1-b}{qn_i(1+b)}$$

$$=\frac{1-78000/780}{1.6\times10^{-19}\times1.6\times10^{16}(1+78000/780)}$$

$$=-3.8\times10^{2}(\mathrm{cm^3/C})=-3.8\times10^{-4}(\mathrm{m^3/C})$$

(2) 由式(1)知，当 $R_H=0$ 时

$$p-nb^2=0$$

由平衡浓度关系 $pn=n_i^2$ 与上式联立，即可求 $n$、$p$

$$n=\frac{n_i}{b}=\frac{1.6\times10^{16}}{78000/780}=1.6\times10^{14}(1/\mathrm{cm^3})$$

$$p=bn_i=\frac{78000\times1.6\times10^{16}}{780}=1.6\times10^{18}(1/\mathrm{cm^3})$$

(3) 本征电阻率为

$$\begin{aligned}\rho_i=\sigma_i^{-1}&=[n_i g(\mu_n+\mu_p)]^{-1}\\&=[1.6\times10^{16}\times1.6\times10^{-19}\times(78000+780)]^{-1}\\&=4.96\times10^{-3}(\Omega\cdot\mathrm{cm})\end{aligned}$$

(4) 判断是否是弱磁场

$$\begin{aligned}|\tan\theta|=\mu_H B_z=B_z\,|\sigma R_H|&=\frac{B_z}{\rho}\,|R_H|\\&=\frac{0.1\times|-3.8\times10^{-4}|}{4.96\times10^{-5}}\\&=0.8\end{aligned}$$

所以磁场既不是弱磁场，也不是强磁场($|\tan\theta|\gg1$)。现用弱场近似的公式粗略地估算一下本征情况如 $0.1\mathrm{Wb/m^2}$，长声学波散射时的电阻率。

$$\frac{\Delta\rho}{\rho_0}=\xi(\mu_H B_z)^2$$

$$\begin{aligned}\rho&=\rho_0+\rho_0\xi(\mu_H B_z)^2\\&=4.96\times10^{-3}+4.96\times10^{-3}\times0.275\times(0.8)^2\\&=5.83\times10^{-3}(\Omega\cdot\mathrm{cm})\end{aligned}$$

上式 $\xi$ 取 0.275。这是只有一种载流子时长声学波散射的横向磁阻系数。考虑了载流子的速度的统计分布。所以用另一种载流子的公式估算是因为 $\mu_n\gg\mu_p$。

如果不计速度的统计分布，只考虑两种载流子导电，则横向磁阻系数 $\xi$ 为

$$\begin{aligned}\xi=\frac{npb(1+b)^2}{(nb^2-p)^2}=\frac{bn_i^2(1+b)^2}{n_i^2(1+b)^2(1-b)^2}&=\frac{b}{(1-b)^2}\\&=\frac{78000/780}{(1-78000/780)^2}=0.01\end{aligned}$$

$(0.01\ll0.275)$

**【例 12-11】** 对厚度为 0.08cm 的 n 型 GaAs，沿 $x$ 方向通以 50mA 的电流，沿 $z$ 方向加以 0.5T 的磁场，得到−0.4mV 的霍尔电压，试求：(1) 霍尔系数；(2) 载流子浓度；(3) 如材料电阻率为 $1.5\times10^{-3}\ \Omega\cdot\mathrm{cm}$，求载流子的迁移率。

**解：**

(1) n 型的霍尔系数应为负

$$R_{\mathrm{H}}=\frac{V_{\mathrm{H}}d}{I_xB_z}=\frac{(-0.4\times10^{-3})\times0.08\times10^{-2}}{50\times10^{-3}\times0.5}$$
$$=1.28\times10^{-5}(\mathrm{m^3/C})$$

(2) 载流子浓度 $n$ 为

$$n=-\frac{1}{R_{\mathrm{H}}q}=\frac{-1}{-1.28\times10^{-5}\times1.6\times10^{-19}\times10^{6}}$$
$$=4.88\times10^{-7}(1/\mathrm{cm^3})$$

(3) 霍尔迁移率定义为

$$\mu_{\mathrm{H}}=|R_{\mathrm{H}}\sigma_0|=\frac{1}{\rho_0}|R_{\mathrm{H}}|$$
$$=\frac{12.8}{1.5\times10^{-3}}=8.53\times10^{3}[\mathrm{cm^2/V\cdot s}]$$

**【例 12-12】** 设弛豫时间 $\tau$ 为常数,试计算 n 型半导体的霍尔系数。

**解:** 设外加电场$\mathscr{E}$和磁场 $\boldsymbol{B}$ 分别沿 $x$ 方向和 $z$ 方向,则电子的运动方程可以写成

$$\left.\begin{aligned}\dot{v}_x&=-\left(\frac{e}{m_{\mathrm{n}}}\right)\mathscr{E}_x-\omega v_y\\ \dot{v}_y&=-\left(\frac{e}{m_{\mathrm{n}}}\right)\mathscr{E}_y-\omega v_x\end{aligned}\right\}\tag{1}$$

式中,$m_{\mathrm{n}}$ 是电子的有效质量,$\omega=\dfrac{eB}{m_{\mathrm{n}}}$ 是电子绕磁场旋转的角频率。

引入复变数 $z=v_x+\mathrm{i}v_y$,式(1)可改写成

$$\dot{z}_y=-\mathrm{i}\omega z=-\left(\frac{e}{m_{\mathrm{n}}}\right)(\mathscr{E}_x+\mathrm{i}\mathscr{E}_y)\tag{2}$$

它的一般解是

$$z=z_0\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}+\left(\frac{e}{m_{\mathrm{n}}}\right)\frac{\mathscr{E}_x+\mathrm{i}\mathscr{E}_y}{\mathrm{i}\omega}(1-\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t})\tag{3}$$

式中,$z_0=v_{x0}+\mathrm{i}v_{y0}$ 是由初始速度决定的常数。

在两次散射之间,电子在外场作用下运动。散射时间为 $t$ 的概率是 $\dfrac{1}{\tau}\mathrm{e}^{tZ\tau}\mathrm{d}t$。

为了计算电子经历多次散射的平均运动速度,可以把式(3)对所有的散射时间求平均,即求

$$\bar{Z}=\int_0^{\infty}Z\,\frac{1}{\tau}\mathrm{e}^{tZa}\mathrm{d}t$$

由于每次散射后 $Z_0$ 是完全无规则的,所以式(3)中第一项的平均值为零。于是

$$\bar{Z}=\bar{v}_x+\mathrm{i}\bar{v}_y$$
$$=\left(\frac{e}{m_{\mathrm{n}}}\right)\frac{\mathscr{E}_x+\mathrm{i}\mathscr{E}_y}{\mathrm{i}\omega}\int_0^{\infty}\frac{1}{\tau}(1-\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t})\mathrm{e}^{-i/\tau}\mathrm{d}t$$

$$= -\left(\frac{e}{m_{\mathrm{n}}}\right)(\mathscr{E}_x + \mathrm{i}\mathscr{E}_y) + \frac{\tau}{1 - \mathrm{i}\omega\tau}$$

分开实数部分和虚数部分，并利用 $j_x = -ne\bar{v}_x$ 和 $j_y = -ne\bar{v}_y$，则得

$$j_x = \frac{ne^2}{m_{\mathrm{n}}}\left[\frac{\tau\mathscr{E}_x}{1+\omega^2\tau^2} - \frac{\omega\tau^2\mathscr{E}_y}{1+\omega^2\tau^3}\right] \tag{4}$$

$$j_y = \frac{ne^2}{m_{\mathrm{n}}}\left[\frac{\tau\mathscr{E}_y}{1+\omega^2\tau^2} - \frac{\omega\tau^2\mathscr{E}_x}{1+\omega^2\tau^2}\right] \tag{5}$$

条件 $j_y = 0$ 给出

$$\frac{\mathscr{E}_y}{\mathscr{E}_x} = -\omega\tau \tag{6}$$

把式(6)代入式(4)中，消去 $\mathscr{E}_x$ 后可得

$$j_x = -\frac{ne^2}{m_{\mathrm{n}}} \cdot \frac{1}{\omega}\mathscr{E}_y = -\frac{ne}{B}\mathscr{E}_y$$

把上式和霍尔系数 $R$ 的定义 $\mathscr{E}_y = Rj_xB$ 对比，即可求出 n 型半导体的霍尔系数

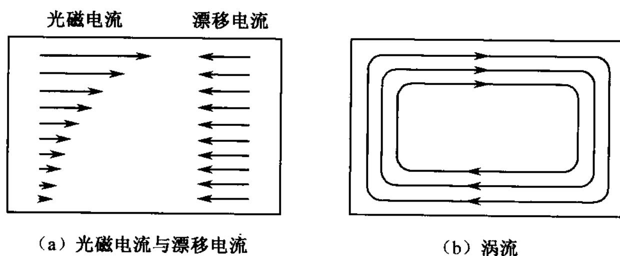
$$R = -\frac{1}{ne}$$

**【例 12-13】** 试说明在光磁效应中样品中的电流形成涡流。

**解：** 如图 12-14(a)所示，当光沿 $y$ 方向照射样品时，光磁电流在 $y$ 方向指数地衰减，即

$$j_x \propto \exp(-y/L_{\mathrm{p}})$$

而由光磁电流引起的电荷积累在垂直 $x$ 的两个面上是均匀分布的，因而由光磁电势差引起的漂移电流沿 $y$ 方向是均匀分布的。在 $x$ 方向断路时，在稳定情况下，上述两个电流总是相等的，因而在样品中引起如图 12-14(b)所示的涡流。




(a) 光磁电流与漂移电流　　(b) 涡流

图 12-14

**【例 12-14】** 试证明：在测量霍尔系数时，分别改变电流和磁场的方向测量 4 次横向电压，就能消除除爱廷豪森效应以外的其他热磁效应引起的误差。

**证明：** 测量霍尔电势差时热电效应及热磁效应会引起一系列误差。如在 $x$ 方向有电流通过时，由于帕尔帖效应使样品一端吸热温度降低，另一端放热温度升高，因而在样品两端产生温度差，当 $z$ 方向加有磁场 $B$ 时就引起热磁效应。

(1) 爱廷豪森效应：当 $x$ 方向有电流、$z$ 方向有磁场时，将在 $y$ 方向产生温度差。这

个温度差将引起相应的电势差，以 $V_E$ 表示。它的正、负与电流 $I$ 及磁场 $B$ 的方向有关。

(2) 能斯脱效应：在 $x$ 方向有热流、$z$ 方向有磁场时，在 $y$ 方向产生电势差，以 $V_N$ 表示。其方向与热流及磁场方向有关，与电流方向无关。

(3) 里纪—勒杜克效应：在 $x$ 方向有热流、$z$ 方向有磁场时，在 $y$ 方向会有温度差，又由塞贝克效应引起相应电势差，用 $V_{RL}$ 表示。它的方向与热流及磁场方向有关，与电流方向无关。

所以如图 12-15 所示，探针 A、B 间的电势差是霍尔电势差与这些电势差之和。

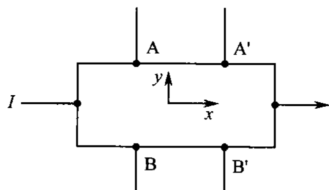



图 12-15

第一组当正电流、正磁场($+I,+B$)时测得

$$(V_{AB})_1 = +V_H + V_E + V_N + V_{RL}$$

第二组当负电流、正磁场($-I,+B$)时测得

$$(V_{AB})_2 = -V_H - V_E + V_N + V_{RL}$$

第三组当负电流、负磁场($-I,-B$)时测得

$$(V_{AB})_3 = +V_H + V_E - V_N - V_{RL}$$

第四组当正电流、负磁场($+I,-B$)时测得

$$(V_{AB})_4 = -V_H - V_E - V_N - V_{RL}$$

从以上 4 个算式可得

$$V_H + V_E = \frac{1}{4}[(V_{AB})_1 - (V_{AB})_2 + (V_{AB})_3 - (V_{AB})_4]$$

这就是求证的结果。即 4 次测量结果的组合为 $V_H$ 和 $V_E$ 之和，由于 $V_E$ 较小，所以上式可近似代表霍尔电势差。

**【例 12-15】** 在测定半导体霍尔系数的实验中，由外电场 $\varepsilon_x$ 导入的电流 $J_x$ 称为原电流。在洛仑兹力和霍尔电场 $\varepsilon_y$ 作用下产生的横向电流包括电子电流分量 $J_{ny}$ 和空穴电流分量 $J_{py}$，(1) 求比值 $f_c = J_{ny}/J_x$ 和 $f_h = J_{py}/J_x$；(2) 证明当电子电导率与空穴电导率相等时，上述比值有极大值。

**解：** 令 $n$、$p$；$\mu_n$、$\mu_p$；$\sigma_n$、$\sigma_p$ 分别为电子和空穴的浓度、迁移率和电导率。设电场 $\varepsilon_x$ 沿 $x$ 轴向，磁场 $B_z$ 沿 $z$ 轴向，则横向霍尔电场沿 $y$ 轴向，平衡值为 $\varepsilon_y$。于是由洛仑兹力引起的电子电流密度为 $ne\mu_n v_{ex} B_z = ne\mu_n^2 \varepsilon_x B_z$，由霍尔电场引起的电子电流密度为 $ne\mu_n\varepsilon_y$，故横向电子电流密度为

$$J_{ny} = ne\mu_n(\varepsilon_y + \mu_n\varepsilon_x B_z) \tag{1}$$

同理，横向空穴电流密度为

$$J_{py} = pe\mu_p(\varepsilon_y - \mu_p\varepsilon_x B_z) \tag{2}$$

稳定时，横向电流密度 $J_y = J_{ny} + J_{py} = 0$，解得霍尔电场强度

$$\varepsilon_y = \frac{p\mu_p^2 - n\mu_n^2}{(p\mu_p + n\mu_n)}\varepsilon_x B_z \tag{3}$$

将式(3)代入式(1)，则

$$J_{ny} = ne\mu_n\varepsilon_x B_z\left(\frac{p\mu_p^2 - n\mu_n^2}{p\mu_p + n\mu_n} + \mu_n\right)$$

$$= ne\mu_n\varepsilon_x B_z p\mu_p(\mu_n+\mu_p)/(p\mu_p+n\mu_n)$$

$$= J_x B_z(\mu_p+\mu_n)\sigma_p\sigma_n/(\sigma_p+\sigma_n)^2 \tag{4}$$

其中考虑到 $J_x=\sigma\varepsilon_x=(\sigma_n+\sigma_p)\varepsilon_x=(ne\mu_n+pe\mu_p)\varepsilon_x$。由式(4)即得横向电子电流与原电流之比为

$$f_c=\frac{J_{ny}}{J_x}=B_z(\mu_p+\mu_n)+\frac{\sigma_p\sigma_n}{(\sigma_p+\sigma_n)^2} \tag{5}$$

由平衡条件 $J_y=J_{ny}+J_{py}=0$ 得 $J_{py}=-J_{ny}$，故横向空穴电流与原电流之比

$$f_h=J_{py}/J_x=-f_c \tag{6}$$

**证明一：** 对于给定样品，$\mu_p$、$\mu_n$ 可视做常数。将式(5)两边对 $\sigma$ 求导，并使之为零，即

$$\frac{\partial f_c}{\partial\sigma_n}=B_z(\mu_p+\mu_n)\frac{\sigma_p(\sigma_p+\sigma_n)^2-2(\sigma_p+\sigma_n)\sigma_p\sigma_n}{(\sigma_p+\sigma_n)^4}$$

$$=B_z(\mu_p+\mu_n)\frac{\sigma_p(\sigma_p-\sigma_n)}{(\sigma_p+\sigma_n)^3}=0$$

由此得 $f_c$ 取极值的条件为 $\sigma_n=\sigma_p$。在此条件下，$f_c$ 取极大值

$$f_{c,\max}=B_z(\mu_n+\mu_p)/4$$

同理

$$f_{h,\max}=-B_z(\mu_n+\mu_p)/4$$

**证明二：** 或者将式(5)改写为

$$f_c=B_z(\mu_n+\mu_p)\frac{\sigma_n\sigma_p}{(\sigma_n-\sigma_p)^2+4\sigma_n\sigma_p}$$

$$=B_z(\mu_n+\mu_p)\frac{1}{(\sigma_n-\sigma_p)^2/\sigma_n\sigma_p+4}$$

显然当 $\sigma_n=\sigma_p$ 时，上式右侧分母有最小值。因而 $f_c$ 取极大值

$$f_{c,\max}=B_z(\mu_n+\mu_p)/4$$

**【例 12-16】** 对于 p 型样品，证明

$$\frac{|R_{ext}|}{R_s}=\frac{(b-1)^2}{4b}$$

式中 $R_s$ 是饱和电离区的霍尔系数，$R_{ext}$是霍尔系数的极值。

**解：** 两种载流子的霍尔系数可以写成

$$R=\left(\frac{\mu_H}{\mu}\right)\frac{p-nb^2}{(p+nb)^2e} \tag{1}$$

对于 p 型半导体，当温度超过饱和电离区以后，随着温度的升高，$R$ 减小。在 $p=nb^2$ 时，$R=0$；温度进一步升高时，$R$ 变为负值。那么当温度再升高(或者说电子和空穴密度增加)时，$R$ 又将怎样变化呢？

在上述温度范围内，电中性条件是

$$p=N_a+n$$

把它代入 $R$ 的表示式中，则有

$$R=\frac{\mu_H}{\mu}\frac{1}{e}\cdot\frac{N_a+(1-b^2)n}{[N_a+(1-b)n]^2}$$

两边对 $n$ 求微商

$$\frac{\partial R}{\partial n}=-\frac{\mu_H}{\mu}\frac{(1+b)^2}{e}\cdot\frac{N_a+(1-b)n}{[N_a+(1-b)n]^3}$$

由 $\partial R/\partial n=0$ 可得

$$\begin{cases}n=\dfrac{N_a}{b-1}\\[2ex] p=\dfrac{N_{ab}}{b-1}\end{cases}\tag{2}$$

容易验证,载流子密度为上述数值时

$$\frac{\partial^2 R}{\partial n^2}>0$$

即霍尔系数的绝对值取极大值。把式(2) 代入 $R$ 的公式中

$$|R_{ext}|=(\frac{\mu_H}{\mu})\frac{1}{N_ae}\cdot\frac{(b-1)^2}{4b}$$

对于 p 型半导体,在饱和电离区的霍尔系数

$$R_s=\frac{\mu_H}{\mu}\frac{1}{N_ae}$$

所以

$$\frac{|R_{ext}|}{R_s}=\frac{(b-1)^2}{4b}$$

**解:** 先求电子和空穴密度。

根据

$$p=9n$$

和

$$np=n_i^2$$

可以求出

$$n=\frac{1}{3}n_i,\quad p=3n_i$$

把这个结果代入霍尔系数公式(见例 12-16 的式(1))中(设 $\mu_H/\mu=1$ ),则得

$$\begin{aligned}R&=\frac{p-nb^2}{(p+nb)^2e}\\&=\frac{9-b^2}{(9+b^2)}\frac{3}{n_ie}\\&\approx-\frac{b^2}{(9+b)^2}\frac{3}{n_ie}\\&=-\left(\frac{100}{109}\right)^2\times\frac{3}{1.1\times10^6\times1.6\times10^{-19}}\end{aligned}$$

$$=-1.43\times10^{3}(\mathrm{cm^3/C})$$

根据 $p=9n$，样品当然是 p 型的。由于 p 型样品在高温区霍尔系数改变符号，所以，尽管在室温下 $R<0$，样品却是 p 型的。由这个例子可以看出，当两种载流子对导电的贡献都不能忽略时，不能用 $R$ 的符号来判别导电类型。对于一个确定的样品，只有在一种载流子对导电起主要作用的较低温度范围内，才能依据 $R$ 的正负来判断导电类型。

**【例 12-17】** 一个电导率为 0.001/(Ω · cm)的硅样品，在弱磁场下霍尔电压为零。假设电子[$\mu_n=1300\ \mathrm{cm^2/(V\cdot s)}$]和空穴[$\mu_p=300\ \mathrm{cm^2/(V\cdot s)}$]的霍尔因子相同，试确定载流子密度。

**解**：在 p 型半导体中，当霍尔系数 $R=0$ 时，霍尔电压才为 0。根据两种载流子霍尔系数，这时的电子密度和空穴密度有如下关系

$$p=nb^2$$

两种载流子导电的电导率

$$\sigma=e\mu_p(p+nb)$$

由以上面两个等式可求出

$$n=\frac{\sigma}{e(\mu_n+\mu_p)}\ \frac{1}{b}$$
$$=\frac{0.001}{1.6\times10^{\ 19}\times(1300+300)}\times\frac{300}{1300}$$
$$=0.90\times10^{12}(1/\mathrm{cm^3})$$

$$p=\frac{\sigma}{e(\mu_n+\mu_p)}\ b=1.69\times10^{13}(1/\mathrm{cm^3})$$

**【例 12-18】** 实验测得一个锗样品不呈现任何霍尔效应。若已知锗中电子迁移率 $\mu_n=3500\ \mathrm{cm^2/(V\cdot s)}$，空穴迁移率 $\mu_p=1400\ \mathrm{cm^2/(V\cdot s)}$。问电子电流在该样品的总电流中所占的比例等于多少?

**解**：设电场沿 $x$ 方向，样品的总电流可以写成由电子所携带的那部分电流为

$$J=e(n\mu_e+p\mu_h)\varepsilon$$

由电子所携带的那部分电流为

$$J_e=en\mu_e\mathscr{E}$$

因而电子电流在总电流中所占分数

$$f=\frac{J_e}{J}=\frac{n\mu_e}{n\mu_e+p\mu_h}=\left(1+\frac{p\mu_h}{n\mu_e}\right)^{-1}\tag{1}$$

其次，当存在电子和空穴两种载流子时，霍尔电场为

$$\mathscr{E}_y=\frac{p\mu_h^2-n\mu_e^2}{e(p\mu_h+n\mu_e)^2}J_xB$$

由于题设不出现霍尔效应，即 $\mathscr{E}_y=0$，由上式得

$$p\mu_h^2-n\mu_e^2=0$$

于是

$$\frac{p\mu_h}{n\mu_e}=\frac{\mu_e}{\mu_h} \tag{2}$$

把式(2)代入式(1)，并把题给数值代入，即得

$$f=\left(1+\frac{\mu_e}{\mu_h}\right)^{-1}=\left(1+\frac{3500}{1400}\right)^{-1}=\frac{2}{7}$$

**【例 12-19】** 已知 InSb 的禁带宽度 $E_g=0.15\text{eV}$，电子的有效质量 $m_e=0.014m_0$，空穴的有效质量 $m_h=0.18m_0$（$m_0$ 为电子的惯性质量）。若只有电子才是有效载流子，试求 300K 下纯 InSb 的霍尔系数。

如果让 100mA 的电流通过一宽度 $b$ 为 5mm，厚度 $d$ 为 1mm 的 InSb 的样品，垂直方向的磁场为 0.1T，将产生多大的霍尔电压？

**解：** 当只有电子是有效载流子时，在 SI 单位制下，霍尔系数

$$R_H=-\frac{1}{ne}$$

其中 $n$ 为电子浓度，它可按下式求出

$$\begin{aligned}n&=\sqrt{N_cN_v}\,e^{-E_g/2k_BT}\\&=2\frac{(2\pi k_BT)^{3/2}}{h^3}(m_cm_h)^{3/4}e^{-E_g/2k_BT}\end{aligned}$$

代入下列数据

$$m_e=0.014m_0=0.014\times9.1\times10^{-31}(\text{kg})$$

$$m_h=0.18m_0=0.18\times9.1\times10^{-31}(\text{kg})$$

$$m_g=0.15\text{eV}=0.15\times1.6\times10^{-19}(\text{J})$$

$$T=300\ (\text{K})$$

$$k_B=1.38\times10^{-23}(\text{J/K})$$

$$h=6.63\times10^{-34}(\text{J}\cdot\text{s})$$

可得

$$n=8.6\times10^{21}(\text{m}^{-3})$$

因此

$$\begin{aligned}R_H&=-\frac{1}{ne}=-\frac{1}{8.6\times10^{21}\times1.6\times10^{-19}}\\&=-7.2\times10^{-4}(\text{m}^3/\text{C})\end{aligned}$$

若样品的宽度为 $b$，厚度为 $d$，霍尔电压 $V_H$ 可写成

$$V_H=b\mathscr{E}_y=b(R_HB_zJ)$$

式中，$\mathscr{E}_y=R_HB_zJ$ 为霍尔电场；$B_z$ 为 $z$ 方向的磁场；$J=I/bd$ 为 $x$ 方向的电流密度；$I$ 是电流强度。因此

$$V_H=bR_HB_z\frac{1}{bd}=R_HB_zJ/d$$

代入下列数据

$$R_H = -7.2\times10^{-4}(\mathrm{m^3/C})$$
$$R = 0.1(\mathrm{T})$$
$$J = 100(\mathrm{mA}) = 0.1(\mathrm{A})$$
$$d = 1(\mathrm{mm}) = 10^{-3}(\mathrm{m})$$

得
$$|V_H| = 7.2\times10^{-4}\times0.1\times\frac{0.1}{10^{-3}} = 7.2\times10^{-3}(\mathrm{V}) = 7.2(\mathrm{mV})$$

**【例 12-20】** 如在一样品的 $x$ 方向上加有电场 $\mathscr{E}$、在 $z$ 方向加有磁场 $B_z$，某空穴在 $t=0$ 时 $v_{x0}=v_0\cos\theta, v_{y0}=v_0\sin\theta$。这里 $\theta$ 为空穴初速度与 $x$ 轴夹角。试证位移对 $\theta$ 的平均值与 $v_0$ 无关。并讨论此结果说明什么问题?

**证明：** 空穴在电磁场中的运动方程为

$$m_p^*\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t} = q\mathscr{E} + q\boldsymbol{v}\times B_z$$

它的分量式为

$$\frac{\mathrm{d}v_x}{\mathrm{d}t} = -\frac{q}{m_p^*}\mathscr{E} + \omega v_y$$
$$\frac{\mathrm{d}v_y}{\mathrm{d}t} = -\omega v_x$$
$$\frac{\mathrm{d}v_z}{\mathrm{d}t} = 0$$

式中 $\omega = \frac{qB_z}{m_p^*}$。解此组方程并用给定的初始条件和起始时刻的坐标为零，得

$$x = \frac{1}{\omega}(1-\cos\omega t)\,v_0\sin\theta + \frac{1}{\omega}\sin\omega t\,v_0\cos\theta + \frac{q\mathscr{E}}{m_p^*\omega^2}(1-\cos\omega t)$$
$$y = -\frac{1}{\omega}(1-\cos\omega t)\,v_0\cos\theta + \frac{1}{\omega}\sin\omega t\,v_0\sin\theta + \frac{q\mathscr{E}}{m_p^*\omega^2}\sin\omega t - \frac{q\mathscr{E}}{m_p^*\omega}t$$

求位移对 $\theta$ 的平均就是对初速度大小完全相同但是方向是均匀分布在各个方向的所有空穴求平均，即

$$\bar{x} = \frac{\int_0^{2\pi}x\,\mathrm{d}\theta}{\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\theta} = \frac{q\mathscr{E}}{m_p^*\omega^2}(1-\cos\omega t)$$
$$\bar{y} = \frac{\int_0^{2\pi}y\,\mathrm{d}\theta}{\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\theta} = \frac{q\mathscr{E}}{m_p^*\omega^2}\sin\omega t - \frac{q\mathscr{E}}{m_p^*\omega}t$$

由 $\bar{x}$、$\bar{y}$ 与 $\theta$ 无关说明空穴的初始速度的无规则性并不影响在电磁场中的平均运动，即说明样品中起始的无规则热运动并不影响霍尔测量的结果。

【例 12-21】 试证明在两种载流子同时存在和弱磁场条件下的霍尔效应中，霍尔角 $\theta$ 和霍尔系数 $R$ 可分别表示成

$$\theta = \arctan \frac{p\mu_p^2 - n\mu_n^2}{p\mu_p + n\mu_n} B_z$$

$$R = \frac{1}{q} \frac{p\mu_p^2 - n\mu_n^2}{(p\mu_p + n\mu_n)^2}$$

并求：(1) 在磁感应强度为 $B$ 时本征半导体的霍尔角(设 $\mu_n$、$\mu_p$ 为已知)；(2) 若测得某样品的霍尔角 $\theta = 0$，求这时相应的电导率；(3) 如果给定一锗样品放在 $B$=0.1T 的磁场中，求当其电导率最小时 $\tan\theta$ 为多少？设 $\mu_n = 3\ 900 \mathrm{cm^2/(V \cdot s)}$，$\mu_p = 1\ 900 \mathrm{cm^2/(V \cdot s)}$。

**解：** 当没有外磁场、只在 $x$ 方向有电场 $\mathscr{E}_x$ 时，由电子、空穴产生的电流分别为

$$j_{nx} = nq\mu_n \mathscr{E}_x \tag{1}$$

$$j_{px} = pq\mu_p \mathscr{E}_x \tag{2}$$

当存在弱磁场 $B_z$ 时不计及磁阻效应，即电导率和无磁场时相同。在磁场作用下引起相应的横向电流

$$j_{ny} = -j_{nx}\theta_n \tag{3}$$

$$j_{py} = -j_{px}\theta_p \tag{4}$$

式中 $\theta_n$ 及 $\theta_p$ 分别为电子、空穴的霍尔角。另外

$$\theta_n = -\mu_n B_z \tag{5}$$

$$\theta_p = \mu_p B_z \tag{6}$$

由式(1)～式(6)得由磁场引起的总的横向电流为

$$j_y = j_{ny} + j_{py} = -(p\mu_p^2 - n\mu_n^2) q \mathscr{E}_x B_z$$

横向电流 $j_y$ 引起 $y$ 方向的电荷堆积，即建立横向电场 $\mathscr{E}_y$，达到平衡时必满足

$$j_y + \sigma \mathscr{E}_y = 0$$

所以

$$\mathscr{E}_y = \frac{-j_y}{\sigma} = \frac{q(p\mu_p^2 - n\mu_n^2)}{\sigma} \mathscr{E}_x B_z \tag{7}$$

由于 $\sigma = q(n\mu_n + p\mu_p)$ 得

$$\tan\theta = \frac{\mathscr{E}_y}{\mathscr{E}_x} = \frac{p\mu_p^2 - n\mu_n^2}{p\mu_p + n\mu_n} B_z$$

或

$$\theta = \mathrm{atctan} \frac{p\mu_p^2 - n\mu_n^2}{p\mu_p + n\mu_n} B_z \tag{8}$$

由式(7)得霍尔系数

$$R=\frac{\mathscr{E}_y}{j_xB_z}=\frac{q(p\mu_p^2-n\mu_n^2)}{\sigma^2}$$

$$=\frac{1}{q}\frac{p\mu_p^2-n\mu_n^2}{(p\mu_p+n\mu_n)^2} \tag{9}$$

式(8)、式(9)即为欲得的结果。

(1) 所考虑的样品为本征的，故 $n=p=n_i$，以此代入式(8)得

$$\theta=\arctan(\mu_p-\mu_n)B$$

(2) 由于 $\theta=0$，由式(8)得

$$p=\left(\frac{\mu_n}{\mu_p}\right)^3 n$$

于是这时的电导率

$$\sigma=q(p\mu_p+n\mu_n)$$

$$=qn\mu_n(1+b)$$

式中 $b=\frac{\mu_n}{\mu_p}$。

(3) 为求样品电导率为极小的 $\tan\theta$ 值，可根据 $\sigma=nq\mu_n+pq\mu_p$ 及 $np=n_i^2$，得电导率为极小时（$\sigma=\sigma_{min}$）

$$n=n_i(\mu_p/\mu_n)^{1/2} \tag{10}$$

$$p=n_i(\mu_n/\mu_p)^{1/2} \tag{11}$$

式(10)、式(11)代入式(8)，得

$$\tan\theta=\frac{1}{2}(\mu_p-\mu_n)B$$

将数字代入得

$$\tan\theta=\frac{1}{2}\times 0.1\times(0.19-0.39)=-0.01$$

**【例 12-22】** 在测定半导体霍尔系数的实验中，由外电场 $\mathscr{E}_x$ 导入的电流称为原电流，在洛仑兹力和霍尔电场作用下产生了横向电子电流 $J_{ey}$ 和横向空穴电流 $J_{py}$。

(1) 求平衡时，横向电子电流和空穴电流与原电流之比。

(2) 证明，当电子和空穴的电导率相等时，上述比值达到极大值。

**解：** 令 $n$、$p$；$\mu_e$、$\mu_h$；$\sigma_e$、$\sigma_h$ 分别代表两种载流子的浓度、迁移率和电导率。设外电场 $\mathscr{E}_x$ 沿 $x$ 轴正方向，磁场 $B$ 沿 $z$ 轴正方向平衡时，横向霍尔电场为 $\mathscr{E}_y$。于是，横向电子电流

$$J_{ey}=ne\mu_e\mathscr{E}_y-ne\mu_e v_{ex}B$$

$$=ne\mu_e(\mathscr{E}_y+\mu_e\mathscr{E}_xB) \tag{1}$$

式中 $v_{ex}=-\mu_e\mathscr{E}_x$，平衡时，半导体的霍尔系数

$$R_H=\frac{\mathscr{E}_y}{J_xB}=\frac{p\mu_h^2-n\mu_e^2}{e(p\mu_h+n\mu_e)^2}$$

因而霍尔电场

$$\mathscr{E}_y = J_x B R_{\mathrm{H}} = J_x B \frac{p\mu_{\mathrm{h}}^2 - n\mu_{\mathrm{e}}^2}{\mathrm{e}(p\mu_{\mathrm{h}} + n\mu_{\mathrm{e}})^2}$$

由于

$$\begin{aligned} J_x &= \sigma\mathscr{E}_x = (\sigma_{\mathrm{e}} + \sigma_{\mathrm{h}})\mathscr{E}_x \\ &= (n\mathrm{e}\mu_{\mathrm{e}} + p\mathrm{e}\mu_{\mathrm{h}})\mathscr{E}_x \end{aligned}$$

可把霍尔电场改写成

$$\mathscr{E}_y = \mathscr{E}_x B \frac{p\mu_{\mathrm{h}}^2 - n\mu_{\mathrm{e}}^2}{p\mu_{\mathrm{h}} + n\mu_{\mathrm{e}}}$$

代入式(1)

$$\begin{aligned} J_{\mathrm{ey}} &= n\mathrm{e}\mu_{\mathrm{e}}\mathscr{E}_x B\left(\frac{p\mu_{\mathrm{h}}^2 - n\mu_{\mathrm{e}}^2}{p\mu_{\mathrm{h}} + n\mu_{\mathrm{e}}} + \mu_{\mathrm{e}}\right) \\ &= n\mathrm{e}\mu_{\mathrm{e}}\mathscr{E}_x B \frac{p\mu_{\mathrm{h}}(\mu_{\mathrm{h}} + \mu_{\mathrm{e}})}{p\mu_{\mathrm{h}} + n\mu_{\mathrm{e}}} \\ &= J_x B(\mu_{\mathrm{h}} + \mu_{\mathrm{e}}) \frac{p\mu_{\mathrm{h}} n\mu_{\mathrm{e}}}{(p\mu_{\mathrm{h}} + n\mu_{\mathrm{e}})^2} \\ &= J_x B(\mu_{\mathrm{h}} + \mu_{\mathrm{e}}) \frac{\sigma_{\mathrm{h}}\sigma_{\mathrm{e}}}{(\sigma_{\mathrm{h}} + \sigma_{\mathrm{e}})^2} \end{aligned}$$

因此,电子电流与原电流之比

$$f_{\mathrm{e}} = \frac{J_{\mathrm{ey}}}{J_x} = B(\mu_{\mathrm{h}} + \mu_{\mathrm{e}}) \frac{\sigma_{\mathrm{h}}\sigma_{\mathrm{e}}}{(\sigma_{\mathrm{h}} + \sigma_{\mathrm{e}})^2} \tag{2}$$

平衡时,$J_y = 0$,必有 $|J_{\mathrm{ey}}| = |J_{\mathrm{hy}}|$,故横向空穴电流与原电流的比值

$$f_{\mathrm{h}} = \frac{J_{\mathrm{hy}}}{J_x} = f_{\mathrm{e}}$$

对于给定的样品,可把迁移率 $\mu_{\mathrm{e}}$、$\mu_{\mathrm{h}}$ 看做常数,把载流子浓度 $n$、$p$ 看做温度 $T$ 的函数,因而 $\sigma_{\mathrm{e}}$、$\sigma_{\mathrm{h}}$ 均为温度 $T$ 的函数。令式(2)两边对 $\sigma_{\mathrm{e}}$ 求导,并使之等于零,得

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_{\mathrm{e}}}{\partial\sigma_{\mathrm{e}}} &= B(\mu_{\mathrm{e}} + \mu_{\mathrm{h}}) \frac{\sigma_{\mathrm{h}}(\sigma_{\mathrm{e}} + \sigma_{\mathrm{h}})^2 - 2(\sigma_{\mathrm{e}} + \sigma_{\mathrm{h}})\sigma_{\mathrm{e}}\sigma_{\mathrm{h}}}{(\sigma_{\mathrm{h}} + \sigma_{\mathrm{e}})^4} \\ &= B(\mu_{\mathrm{e}} + \mu_{\mathrm{h}}) \frac{\sigma_{\mathrm{h}}(\sigma_{\mathrm{h}} - \sigma_{\mathrm{e}})}{(\sigma_{\mathrm{e}} + \sigma_{\mathrm{h}})^8} = 0 \end{aligned}$$

由此得到 $f_{\mathrm{e}}$ 取极大值的条件为

$$\sigma_{\mathrm{e}} = \sigma_{\mathrm{h}} \tag{3}$$

不难验证,在上述条件下,$f_{\mathrm{e}}$ 取极大值

$$(f_{\mathrm{e}})_{\max} = \frac{1}{4}B(\mu_{\mathrm{e}} + \mu_{\mathrm{h}})$$

顺便指出,由于 $\sigma_{\mathrm{e}}$ 和 $\sigma_{\mathrm{h}}$ 在式(2)中处于对称的位置,容易验证,由 $\partial f_{\mathrm{e}}/\partial\sigma_{\mathrm{h}} = 0$ 也同样得到由式(3)表示的极值条件。而且,因为 $f_{\mathrm{e}} = f_{\mathrm{h}}$,上述结论同样适合于横向空穴电流。这表明,$J_{\mathrm{ey}}$ 和 $J_{\mathrm{hy}}$ 同时达到最大值,但方向相反,所以平衡时 $J_y = 0$。

附注：上述结论也可以用下述配方的方法得到：把式(2)改写成

$$f_e = f_h = B(\mu_e + \mu_h)\frac{\sigma_e\sigma_h}{(\sigma_e - \sigma_h)^2 + 4\sigma_e\sigma_h}$$

$$= B(\mu_e + \mu_h)\frac{1}{\frac{(\sigma_e - \sigma_h)^2}{\sigma_e\sigma_h} + 4}$$

显然，当 $\sigma_e = \sigma_h$ 时，上式右端分母有最小值，因而 $f_e = f_h$ 取最大值 $f_{max} = B(\mu_e + \mu_h)/4$。用这个方法可以同时求得 $f$ 取极值的条件和极值，比前一方法更简便。

**【例 12-23】** 计算晶格振动散射的霍尔因子 $A=1.18$，电离杂质散射时 $A=1.93$。

**解：** 如果只考虑一种载流子(如电子)导电，根据霍尔效应的统计理论得到

霍尔系数

$$R = -\frac{1}{nq}\frac{\langle\tau^2 v^2\rangle\langle v^2\rangle}{\langle\tau v^2\rangle^2} \tag{1}$$

漂移迁移率

$$\mu = \frac{q}{m_n^*}\frac{\langle\tau v^2\rangle}{\langle v^2\rangle} \tag{2}$$

霍尔迁移率

$$\mu_H = \frac{q}{m_n^*}\frac{\langle\tau^2 v^2\rangle}{\langle\tau v^2\rangle} \tag{3}$$

由式(2)、式(3)可将式(1)写作

$$R = -\left(\frac{\mu_H}{\mu}\right)\frac{1}{nq} \tag{4}$$

为计算上述结果，考虑漂移迁移率，即

$$\mu = \frac{q}{m_n^*}\frac{\int \tau v^2 f_0 \mathrm{d}k}{\int v^2 f_0 \mathrm{d}k} \tag{5}$$

设为球形等能面 $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n^*}$ 及相空间体积元 $\mathrm{d}\boldsymbol{k} = 4\pi k^2 \mathrm{d}k$，并假设弛豫时间和能量的关系为

$$\tau = \alpha E^{-p} \tag{6}$$

在非简并情况下式(5)变为

$$\mu = \frac{q\alpha}{m_n^*}\frac{\int_0^\infty E^{\frac{3}{2}-p}\exp\left(-\frac{E}{k_0 T}\right)\mathrm{d}E}{\int_0^\infty E^{\frac{3}{2}}\exp\left(-\frac{E}{k_0 T}\right)\mathrm{d}E} \tag{7}$$

由于 $\Gamma$ 函数为

$$\Gamma(t) = \int_0^\infty x^{t-1}\mathrm{e}^{-x}\mathrm{d}x$$

当 $t$ 取正整数时 $\Gamma(t) = (t-1)!$ 及 $\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi}$，则式(7)的结果为

$$\mu = \frac{q\alpha}{m_n^*}(k_0 T)^{-p} \frac{\Gamma\left(\frac{5}{2} - p\right)}{\Gamma\left(\frac{5}{2}\right)} \tag{8}$$

同理可得式(3)的结果为

$$\mu_H = \frac{q\alpha}{m_n^*}(k_0 T)^{-p} \frac{\Gamma\left(\frac{5}{2} - 2p\right)}{\Gamma\left(\frac{5}{2} - p\right)} \tag{9}$$

由式(8)、式(9)得

$$A = \frac{\mu_H}{\mu} \frac{\Gamma\left(\frac{5}{2}\right)\Gamma\left(\frac{5}{2} - 2p\right)}{\left[\Gamma\left(\frac{5}{2} - p\right)\right]^2}$$

如果弛豫时间与能量无关，为一常数，即 $p = 0$，则 $\mu = \mu_H$，$A = 1$，霍尔系数 $R = -\frac{1}{nq}$。但一般情况下 $p \neq 0$，在晶格散射情况下 $\tau \propto E^{-\frac{1}{2}}$，即 $p = 1/2$，这时

$$A = \frac{\mu_H}{\mu} = \frac{3\pi}{8} = 1.18$$

$$R = -1.18 \frac{1}{nq}$$

在电离杂质散射的情况下 $\tau \propto E^{3/2}$，即 $p = -3/2$，这时

$$A = \frac{\mu_H}{\mu} = \frac{315\pi}{312} = 1.93$$

$$R = -1.93 \frac{1}{nq}$$

**【例 12-24】** 若用吸收系数大的波长光照半导体样品时，在表面附近将产生电子—空穴对，试求因迁移率不同的两种载流子在 $x_1$ 和 $x_2$ 两点间感生的丹倍电动势

$$V_{12} = \frac{k_0 T}{q} \frac{\mu_n - \mu_p}{\mu_n + \mu_p} \ln \frac{\sigma_2}{\sigma_1}$$

式中，$\sigma_1$、$\sigma_2$ 分别为 $x_1$ 和 $x_2$ 处的电导率。

**解：** 在一维情况下，电子和空穴的电流密度为

$$J_n = qn\mu_n \mathscr{E} + \mu_n k_0 T \frac{dn}{dx}$$

$$J_p = qp\mu_p \mathscr{E} - \mu_p k_0 T \frac{dp}{dx}$$

总电流密度

$$\begin{aligned} J &= J_n + J_p \\ &= q(n\mu_n + p\mu_p)\mathscr{E} + k_0 T\left(\mu_n \frac{dn}{dx} - \mu_p \frac{dp}{dx}\right) \end{aligned}$$

式中，电场 $\mathscr{E}$ 为内建电场。在开路条件下，$J=0$，于是感生的丹倍电场为

$$E=\frac{k_0T}{q}\frac{\mu_n \mathrm{d}n/\mathrm{d}x-\mu_p \mathrm{d}p/\mathrm{d}x}{n\mu_n+p\mu_p}$$

作为一级近似，取 $\Delta n=\Delta p, \mathrm{d}n/\mathrm{d}x=\mathrm{d}p/\mathrm{d}x=\mathrm{d}(\Delta n)/\mathrm{d}x$。

根据电导率公式

$$\Delta\sigma=q(\mu_n+\mu_p)\Delta n$$

故

$$E=\frac{k_0T}{q}\frac{(\mu_n-\mu_p)}{n\mu_n+p\mu_p}\frac{\mathrm{d}(\Delta n)}{\mathrm{d}x}$$

$$=\frac{k_0T}{q}\frac{(\mu_n-\mu_p)}{(\mu_n+\mu_p)}\frac{1}{\sigma}\frac{\mathrm{d}(\Delta\sigma)}{\mathrm{d}x}$$

所以 $x_1$、$x_2$ 两点间感生的丹倍电动势 $V_{12}$ 为

$$V_{12}=\int_{x_1}^{x_2}E\mathrm{d}x=\frac{k_0T}{q}\frac{(\mu_n-\mu_p)}{(\mu_n+\mu_p)}\ln\frac{\sigma_2}{\sigma_1}$$

**【例 12-25】** 如图 12-16 所示，向半导体加一磁场 $B$，从垂直于 $B$ 的方向以 $h_v\gtrsim\varepsilon_g$ 的光（光强为 $I$）入射于半导体，在半导体表面附近产生电子—空穴对，当电子和空穴向半导体体内扩散时，受洛仑兹力作用而沿 $x$ 方向发生分离，于是在 $x$ 轴方向产生电流或电场。这种现象称为光电磁效应。试对于半导体表面复合速度为零的理想情形求短路电流。

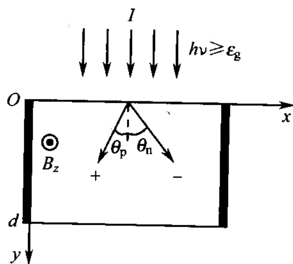



图 12-16 例 12-26 图

**解**：设电子和空穴流动在 $x$ 和 $y$ 方向产生的电流为 $J_x^-$、$J_x^+$、$J_y^-$，$J_y^+$，则基本公式为

$$J_x^-=\theta_n J_y^-+ebn\mu_p E_x$$

$$J_x^+=\theta_p J_y^+ +ep\mu_p E_x$$

式中，$\theta_n=\mu_n B_z, \theta_p=\mu_p B_z$ 。

$$J_y^+=-eD_p\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}y}-\theta_h J_x^+ +ep\mu_p E_y$$

$$J_y^-=-J_y^+=ebd_p\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}y}+\theta_e J_x^-+ebn\mu_p E_y-\frac{\mathrm{d}J_y^+}{\mathrm{d}y}=\frac{\mathrm{e}(p-p_0)}{\tau}$$

式中 $b=\frac{\mu_n}{\mu_p}$。

边界条件为 $E_x=0, y=0$ 时，$J_y^+/e=I$；当 $y=d$ 时 $J_y^+/e=0$。应用以上关系式得

$$I_{SC}=\int_0^d(J_x^-+J_x^+)\mathrm{d}y=\int_0^d\theta J_y^+\mathrm{d}y=eI\theta L^*$$

式中，$\theta=\theta_n+\theta_p=(\mu_n+\mu_p)B_z$，$L^*$ 为双极扩散长度。上式还可以改写为

$$I_{SC}=eI(b+1)\mu_p B(D_p\tau)^{1/2}$$

因而在相同条件下测得的光电流 $\delta J_{pc}$ 为

$$\delta J_{pc} = eI(b+1)\mu_h \tau E_x$$

两式联立，得

$$\frac{J_{SC}}{\delta J_{pc}} = \frac{B}{E_x}\left(\frac{D_p}{\tau}\right)^{1/2}$$

上面的关系式用于测定少数载流子寿命 $\tau$。

当有陷阱效应时，独立测定光电磁场效应寿命 $\tau_{peM} = (p\tau_n + n\tau_p)/(p+n)$ 和光电导寿命 $\tau_{pc} = (\tau_p + b\tau_n)/(1+b)$，即可分别求得 $\tau_n$ 和 $\tau_p$。

**【例 12-26】** n-Si 在单轴应力作用下等同能谷的散射影响可以忽略，试证明 $\pi_{11} = -2\pi_{12}$。

**证明：** 由液体静压强的实验知道，n 型硅原子间距变小时，$E_c$ 下降，$\pi_n$ 是[100]方向加压力，[100]测电阻，这时[010]和[0$\bar{1}$0]、[001]和[00$\bar{1}$]4 个方向能谷的极值都比[100]和[$\bar{1}$00]方向能谷的极值高，所以上述 4 个能谷的电子要往这两个能谷转移。设加压力 $T<0$ 后，4 个能谷转移到[100]、[100]能的电子的总数为 $\Delta n$，则电导率变化为

$$(\Delta\sigma)_l = q\Delta n(\mu_e - \mu_t)$$

当 $\bar{1}$ 在[100]方向，测电阻在[010]方向时，[010]、[0$\bar{1}$0]能谷转移到能谷[100]和[$\bar{1}$00]的电子数为 $\frac{1}{2}\Delta n$，[001]和[00$\bar{1}$]转移到能谷[100]和[$\bar{1}$00]的电子数也为 $\frac{1}{2}\Delta n$。当在[010]方向通电流测电阻时，加压力与否[001]和[00$\bar{1}$]转移到[100]、[$\bar{1}$00]的 $\frac{1}{2}\Delta n$ 的电子对电导的贡献没有变化，不加 $T$ 时，它们的迁移率时 $\mu_t$，到了[$\bar{1}$00]、[100]能谷，也还是 $\mu_t$。所以

$$(\Delta\sigma)_t = q\frac{1}{2}\Delta n(\mu_t - \mu_l)$$

电压阻系数定义得

$$\frac{\pi_{11}}{\pi_{12}} = \frac{\dfrac{\Delta\rho_{11}}{\rho_0}/T}{\dfrac{\Delta\rho_{12}}{\rho_0}/T} = \frac{\Delta\rho_{11}}{\Delta\rho_{12}} = \frac{-(\Delta\sigma)_l\sigma_0^2}{-(\Delta\sigma)_t/\sigma_0^2}$$

$$= \frac{(\Delta\sigma)_l}{(\Delta\sigma)_t} = \frac{q\Delta n(\mu_l - \mu_t)}{q\dfrac{1}{2}\Delta n(\mu_t - \mu_l)} = -2$$

所以

$$\pi_{11} = -2\pi_{12}$$

命题得证。

# 参考文献


1 刘恩科,朱秉升,罗晋生等. 半导体物理学(第七版). 北京:电子工业出版社,2008
2 叶良修. 半导体物理学. 北京:高等教育出版社,1983
3 黄昆,谢希德. 半导体物理学. 北京:科学出版社,1958
4 刘文明. 半导体物理学. 长春:吉林人民出版社,1982
5 方俊鑫,陆栋. 固体物理学. 上海:上海科技出版社,1981
6 P. S. KIREEV. Semiconductor physics. Mir publish, Moscow,1978
7 犬石嘉雄,滨川青弘. 半导体物理学. 北京:科学出版社,1986
8 白藤纯嗣. 半导体物理基础. 北京:高等教育出版社,1982
9 爱德华. S. 杨. 半导体器件基础. 北京:人民教育出版社,1981
10 J. T. 潘可夫. 半导体中的光学过程. 南京:南京大学出版社,1992
11 孙恒慧,包宗明. 半导体物理实验. 北京:高等教育出版社,1985
12 H. C. 凯西,M. B. 帕尼什. 异质结构激光器. 北京:国防工业出版社,1983
13 虞丽生. 半导体异质结构物理 北京:科学出版社,2006
14 沈学础. 半导体光学性质 北京:科学出版社,1992
15 夏建白,朱邦芬. 半导体超晶格物理 上海:上海科学技术出版社,1995
16 [德]K. 西格. 徐乐,钱建业译. 半导体物理学. 北京:人民教育出版社,1980